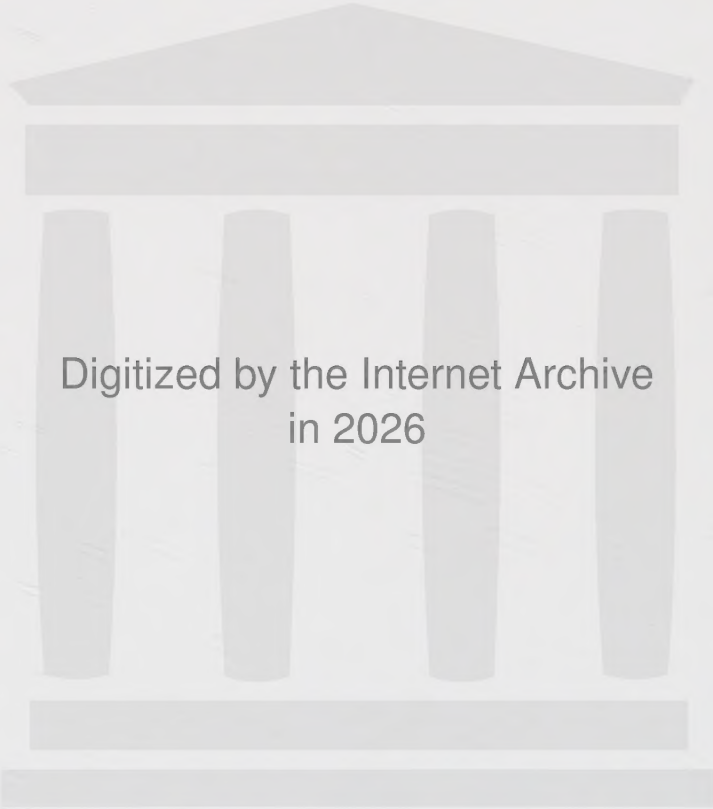


**STRUKTUR UND WACHSTUM
DICHTER MONOATOMARER BLEISCHICHTEN
AUF DER KUPFER-(001)-FLÄCHE**

Wolfgang Hösler
—

1482
—



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41552302_0026

STRUKTUR UND WACHSTUM
DICHTER MONOATOMARER BLEISCHICHTEN
AUF DER KUPFER-(001)-FLÄCHE

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
der Fakultät für Geowissenschaften der
Ludwig-Maximilians-Universität zu München

vorgelegt von
Wolfgang Hösler
aus Landsberg

München 1982

1. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Jagodzinski
 2. Berichterstatter: Prof. Dr. D. Menzel
- Tag der mündlichen Prüfung: 24. November 1982



Inhalt

- 1 Einleitung, 1
- 2 Experiment, 4
 - 2.1 Voraussetzungen, 4
 - 2.1.1 Kristall, 4
 - 2.1.2 Vakuum, 5
 - 2.1.3 Oberflächenpräparation, 6
 - 2.2 Auger-Elektronenspektroskopie, 10
 - 2.2.1 Auger-Spektrometer, 10
 - 2.2.2 qualitative Auger-Analyse, 11
 - 2.2.3 quantitative Auger-Analyse, 15
 - 2.3 Elektronenbeugung, 18
 - 2.3.1 Diffraktometer, 18
 - 2.3.2 Intensitätsmessungen, 23
 - 2.3.3 Profilmessungen, 25
- 3 Ergebnisse, 26
 - 3.1 Kupfer(001), 29
 - 3.2 Kupfer(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° -Blei, 33
 - 3.3 Kupfer(001)-C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° -Blei, 41
 - 3.3.1 'pseudohexagonales' Modell, 43
 - 3.3.2 'Lamellen'-Modell, 47
 - 3.4 Kupfer(001)-(($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° bis C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°)-Blei, 54
- 4 Diskussion, 64
- 5 Zusammenfassung, 67

Anhänge

- A Glossar, 69
- B Einzelheiten der Intensitätsrechnungen, 72
- C die Adsorbat-Debye-Temperatur, 74
- D verunreinigtes Kupfer(001), 77
- E Kupfer(001)- $(2\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})R45^\circ$ -Blei, 80
- F Stufenverteilung auf Kupfer(001), 83
- G Antiphasendomänen mit überlagerter Formfaktormodulation, 85
- H Reflexprofil eines statistischen Mehrdomänensystems, 88
- I Bibliographie, 93
- J Verzeichnis der Abbildungen, 97
- K Sachregister, 99

Teil 1

Einleitung

Die Untersuchung makroskopischer Strukturen dünnster Schichten (gr. lekanomanteia /1//2/) ist etwa vier Jahrtausende alt, erst in den letzten Jahrzehnten jedoch ist deren atomare Struktur einer Analyse zugänglich geworden. Neben anderen strukturempfindlichen Untersuchungstechniken, wie der Feldionenmikroskopie, der Ionen- und Atomstreuung, wurde die Beugung mit langsamen Elektronen (LEED) /3/ zu einer universellen und effektiven Analysemethode von Einkristalloberflächen entwickelt. Fortschritte in theoretischer und numerischer Beschreibung der dynamischen Vielfachstreuung /4//5/ und stete apparative Verbesserungen haben die Lösung etlicher einfacher Strukturen von reinen und adsorbatbedeckten Kristallflächen ermöglicht /6/. Die erreichbare Auflösung ist jedoch noch weit von einer in der Röntgenstrukturanalyse üblichen entfernt, und viele komplexe Überstrukturen haben sich bis jetzt der eindeutigen Interpretation entzogen.

Da sie ein Bild der atomaren Wechselwirkungen an Grenzflächen wiedergeben, finden Rekonstruktionen von reinen Oberflächen spezielles Interesse, und mit Adsorbatüberstrukturen steht ein weitgehend zweidimensionales System zum Testen mikroskopischer Modelle von Phasenübergängen zur Verfügung. Auch stellt die Untersuchung der kristallographischen Struktur, des physikalischen und des chemischen Zustands präparierter Einkristallflächen eine Voraussetzung für das Verständnis der Eigenschaften realer Oberflächen dar. Reale Oberflächen, und damit solche komplexer Struktur, haben stark an technologischer Bedeutung gewonnen; ihre elektronischen Eigenschaften, ihre chemische Passivität und

ihre katalytische Effektivität können durch Adsorbatschichten wesentlich beeinflusst und gezielt gesteuert werden.

In dieser Arbeit wird versucht die Überstrukturen, die ein Metalladsorbat auf einer fcc-(001)-Metalleinkristallfläche bildet, zu analysieren. Wie viele ähnliche Systeme /7//8//9//10//11//12/, bildet das hier untersuchte eine $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur aus, die bei höherer Adsorbatdichte in eine des $C(N\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Typs übergeht. Erstere stellt eine einfache Überstruktur dar, die keine wesentlichen Schwierigkeiten bei ihrer Analyse erwarten läßt. Anders der zweite Strukturtyp, der eine große, mit mehreren Atomen besetzte Überstrukturzelle aufweist. Die Zellgröße der $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur, die eine dichte Bleischicht auf der Kupfer-(001)-Fläche bildet /13//14//15/, läßt noch Modellrechnungen zu und eine Strukturanalyse als möglich erscheinen.

Auf dieser Monoschicht adsorbieren keine weiteren Bleischichten /16/, und sie weist eine stark verringerte chemische Reaktivität gegenüber Sauerstoff auf /17//18/. Für die Struktur dieser Schicht sind zwei gegensätzliche Modellvorschläge gemacht worden. Das erste, allgemein für Oberflächen hoher Bedeckung als wahrscheinlich angesehene Modell nimmt dominierende Adsorbat-Adsorbat-Wechselwirkungen auf einem homogenen Substrat und eine höchste Koordination zwischen den Adsorbatatomen an /13/. Das zweite setzt die Adsorbat-Substrat-Wechselwirkungen als bestimmend voraus, sodaß die innerhalb der obersten Substratschicht vorherrschenden Koordinationen sich auch der Adsorbatschicht aufprägen /19/. Die Analyse der $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur kann ein qualitatives Bild der Wechselwirkungen liefern, das durch eine Untersuchung des isothermen Übergangs zur $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur und der dabei auftretenden Ordnungsvorgänge noch weiter ergänzbar ist.

Der folgende zweite Teil dieser Arbeit beschreibt alle notwendigen Voraussetzungen für die Strukturuntersuchungen. Im dritten Teil werden Strukturanalyseergebnisse genannter geordneter Strukturen vorgestellt, sowie Ergebnisse von

Einleitung

Kupfer(001), das als Testsubstanz Verwendung fand. Auch wird ein Modell des Strukturübergangs gezeigt, das mit den experimentellen Beobachtungen im Einklang ist. Im vierten Teil schließlich werden diese Ergebnisse diskutiert, und es wird versucht, sie in ein konsistentes Gesamtbild einzufügen.

Teil 2

Experiment

Die verwendeten experimentellen Verfahren werden im nachfolgenden dargestellt; die Voraussetzungen für einen definierten Oberflächenzustand, die chemische Analyse der Oberfläche und die Beugungsanordnung werden beschrieben.

2.1 Voraussetzungen

2.1.1 Kristall

Die Eigenschaften von Adsorptionssystemen sind von denen des Substrats mit geprägt; eine Interpretierbarkeit von Adsorbatstrukturen setzt den definierten Zustand des Substrats, dessen chemische Reinheit und kristallographische Ordnung voraus.

Verwendung fand ein Kupfereinkristall mit einem Mosaikspread von ca. $20' / 20''$. Seine Reinheit war etwa 99.995%, und Kohlenstoff, Sauerstoff und Chlor stellten nach Herstellerangaben /21/ die häufigsten Verunreinigungen dar. Mit Laue-Rückstrahlaufnahmen wurde dieser Kristall nach der (001)-Fläche orientiert und mittels Funkenerosion gesägt. Mehrmaliges Überprüfen der Orientierung, Nachjustieren und Funkenerosionsplanieren lieferte eine Übereinstimmung der

Experiment

Voraussetzungen

Oberfläche mit der kristallographischen (001)-Fläche von besser als 0.5 Grad.

Um das atomare Gefüge so wenig wie möglich zu stören, wurde auf jede mechanische Behandlung des Kristalls verzichtet, und die Oberfläche in verdünnter Orthophosphorsäure anodisch poliert /22/. Die optimale Spannung lag bei 1.90V, und die waagrechte Lagerung des Kristalls in der leicht bewegten Säure ergab eine gleichmäßige Politur der ganzen Fläche. Nach dem Abtragen von ca. 0.2mm Kupfer, dem mehrfachen Spülen in destilliertem Wasser und dem Trocknen in Äthanol war die Oberfläche glatt und spiegelnd. Mit Hilfe eines Laserstrahls konnte eine Restwelligkeit von ca. 0.5 Grad bestimmt werden. Der Kristall wurde unmittelbar nach den Politur in den Rezipienten eingesetzt, und dieser evakuiert.

2.1.2 Vakuum

Saubere Oberflächen adsorbieren fortwährend Moleküle der Restgasatmosphäre; Ultrahochvakuum (UHV) verlangsamt die Adsorption und ermöglicht eine für Messungen ausreichende Stabilität der gereinigten Flächen.

Alle Experimente wurden in einer modifizierten kommerziellen Ganzmetall-UHV-Anlage durchgeführt (Abb.1). Der Ausbau des Rezipienten und dessen Anpassung an die Geometrie des Diffraktometers erfolgten mit den für UHV-Anwendungen üblichen Techniken und Werkstoffen /23/.

Die Ausstattung der Anlage mit einem zusätzlichen Pumpensystem gewährleistete kurze Abpumpzeiten nach den Ionenbeschüssen. Mit einer Turbomolekularpumpe, kombiniert mit einer zweistufigen Drehschieberpumpe, konnte in ca. 10 Minuten bis 10^{-9} Torr abgepumpt und dann die Ionenzerstäuberpumpe gestartet werden. Um ein Eindringen von Öldämpfen zu vermeiden, war das UHV-Ventil zwischen der Turbomolekularpumpe und dem Rezipienten nur während dieser Abpumpphase

geöffnet.

Nach dem 24-stündigen Ausheizen der Anlage bei 480K wurde mit der Ionenzerstäuber- und einer Titansublimationspumpe ein Basisdruck von ca. 10^{-11} Torr erreicht. Eine Sublimationsschicht reichte dabei für 1 bis 2 Monate konstante Pumpleistung aus. Im normalen Meßbetrieb, mit emittierender LEED-Kanone und bewegtem Faraday-Becher, stieg der Totaldruck leicht an, blieb aber immer unter $5 \cdot 10^{-11}$ Torr. Dieser Druck wurde auch beim Heizen des Kristalls und beim Aufdampfen von Blei nicht überschritten. Durch die hohe Emission und Erwärmung der Elektronenkanone bedingt, war lediglich bei der Auger-Elektronenspektroskopie ein Druckanstieg auf ca. 10^{-10} Torr zu beobachten. Die Messung des Totaldrucks erfolgte mit Bayard-Alpert-Ionisationsmeßröhren, und zur Partialdruckanalyse war ein Quadrupolmassenspektrometer installiert.

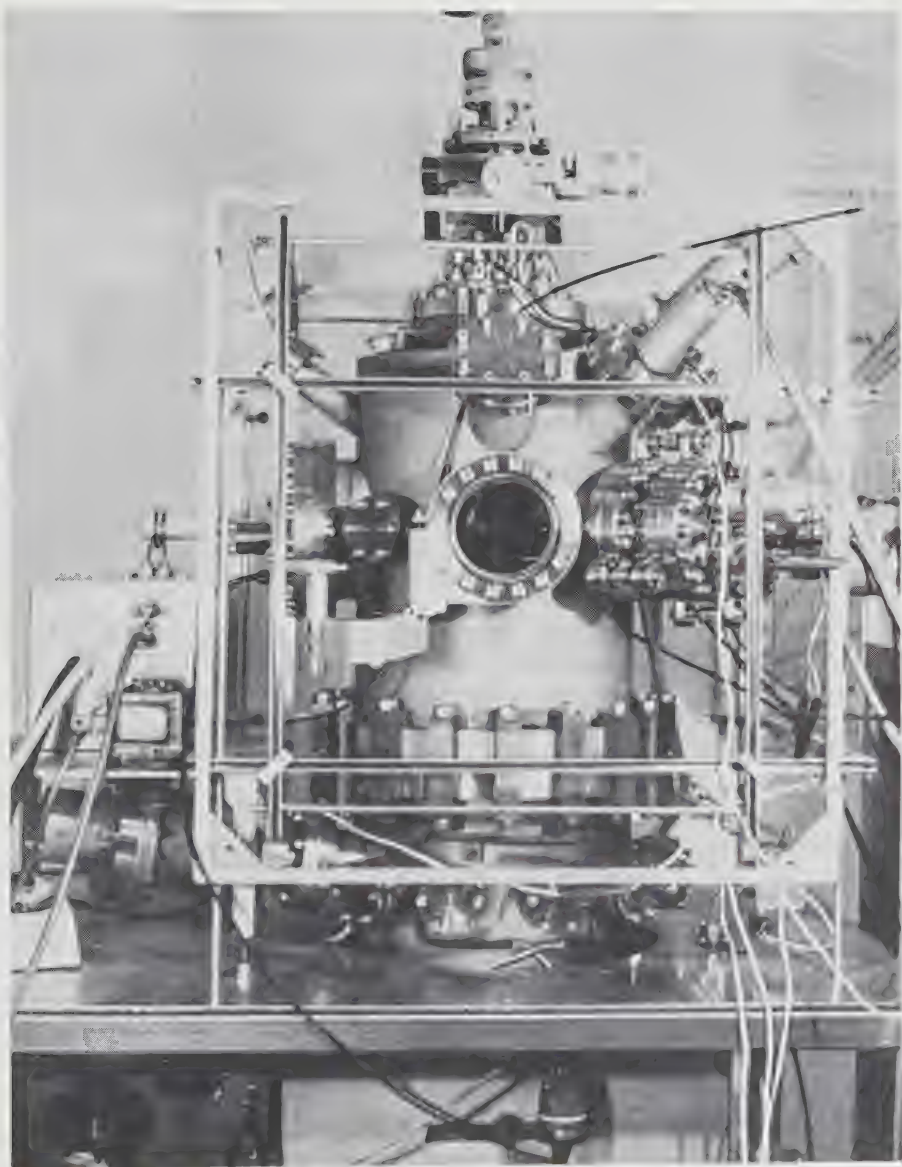
2.1.3 Oberflächenpräparation

Reproduzierbare Messungen setzen den gleichbleibend sauberen und definierten Zustand der Substratoberfläche sowie der adsorbierten Schicht voraus; gewährleisten kann diesen nur die unmittelbar vorangehende Präparation im Ultrahochvakuum.

Abb.1, Ansicht des Rezipienten:

Die von Magnetfeldkompensationsspulen umgebene Beugungskammer bildet eine Einheit mit den darunter liegenden UHV-Pumpen. Der Kristall befindet sich hinter dem Fenster in der Symmetrieachse des Rezipienten, und alle weiteren Einbauten sind auf ihn ausgerichtet.

Experiment
Voraussetzungen



Experiment

Voraussetzungen

Die Oberfläche wurde mit Ionenbeschüssen von Fremdatomen gereinigt. Ein Ventil ermöglichte den dosierten Einlaß von Beschußgas, und bei 10^{-4} Torr emittierte die installierte Kanone /24/ ca. $0.5\mu\text{A}$ Ionen der Energie 300eV . Der Strahl traf unter einem Winkel von 40° zur Flächennormalen auf, und der Brennfleck überdeckte dabei die ganze Kristallfläche. Ein 30-minütiger Beschuß mit Argonionen entfernte alle Adsorbate und Segregate.

Um die beim Argonbeschuß entstandenen Störstellen auszuheilen, konnte der Kristall indirekt geheizt werden. Tempern bei 700K ergab eine schnelle Kontrastzunahme des Beugungsbilds und minimale Reflexbreiten. Heizen bis 900K beschleunigte die Diffusion von Verunreinigungen an die Oberfläche. Etliche Heiz- und Ionenbeschußzyklen waren in der Anfangsphase der Präparation erforderlich, um Kohlenstoff, Schwefel und Chlor aus dem Kristallinneren zu entfernen. Auch die vollständige Desorption von Blei wurde durch das Heizen bis 900K erreicht.

Wegen der niedrigen Debye-Temperatur des adsorbierten Bleis zeigte das Beugungsbild bei Raumtemperatur einen hohen thermisch-diffusen Untergrund und einen nur geringen Kontrast. Sowohl bei der quantitativen Erfassung der Intensitäten als auch bei der qualitativen Begutachtung der Reflexmuster war dies störend, und nur das Kühlen des Kristalls brachte eine Verbesserung. Der Kristallhalter war dazu mit Kupferbändern thermisch an ein Reservoir angekoppelt, dem über ein Kapillarsystem flüssiger Stickstoff zugeführt wurde. Die Isolation des Kristalls und alle Freiheiten seiner Bewegung blieben bei der Kühlung erhalten. Bei stetem Durchpumpen von Stickstoff und emittierender LEED-Kanone lag die Gleichgewichtstemperatur bei 160K , und ihr Erreichen wurde vor jeder Messung abgewartet. Die Temperaturmessung erfolgte mit einem unmittelbar neben dem Kristall fixierten Ni-CrNi-Thermoelement.

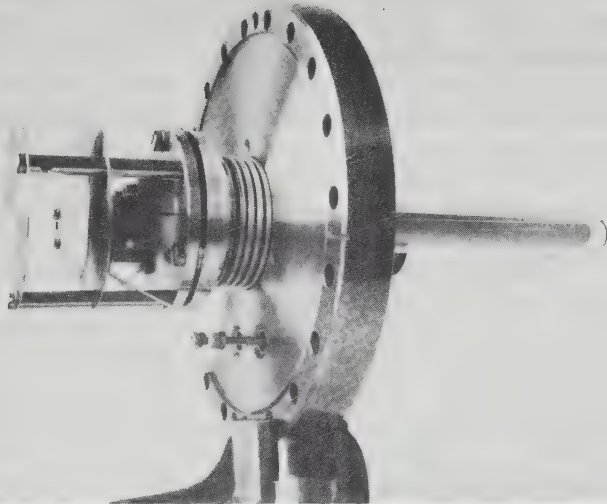


Abb.2, Ansicht des Aufdampfofens:
Die Bleiquelle befindet sich in den konzentrischen Glas- und Keramikröhren und ist induktiv, mit einer über beide Rohre geschobenen Sendespule heizbar. Auf der Vakuumseite des UHV-Flansches sind Blenden zur räumlichen und zeitlichen Begrenzung des Atomstrahls installiert.

Auf eine minimale Gasemission des Aufdampfofens (Abb.2) war Wert gelegt worden, um die Sauberkeit der adsorbierten Bleischicht zu gewährleisten. Das 5.5N-Blei befand sich in einem einseitig geschlossenem Rohr aus Aluminiumoxidkeramik, dessen offenes Ende auf den Kristall ausgerichtet und mit einer drehbaren Blende abdeckbar war. Ein Glasfinger, in den das Keramikrohr ragte, garantierte die Vakuumdichtigkeit des Ofens. Die über den Glas- und Keramikfinger geschobene Sendespule eines Hochfrequenzgenerators heizte ausschließlich das Blei und einen Ring aus Marz-Grad-Kupfer, der die

Experiment

Voraussetzungen

Hf-Ankopplung verbesserte. Die Temperatur konnte mit einem Ni-CrNi-Thermoelement bestimmt werden, das chemisch vom Blei isoliert war, um dessen Legieren zu verhindern. Nach längerem Entgasen des Bleis bei 700K blieb der beim Heizen des Ofens beobachtbare Druckanstieg unter 10^{-11} Torr. Bei einer mittleren Ofentemperatur von 800K war nach ca. 10 Minuten eine Monolage Blei auf dem Kristall adsorbiert. Wegen der Steilheit der Sättigungsdampfdruckkurve /25/ und der thermischen Trägheit des Ofens erwies es sich als schwierig, exakt reproduzierbare Mengen aufzudampfen. Strukturen fester Bedeckung wurden deshalb mittels Erzeugung einer dichteren Struktur, anschließendem Heizen des Kristalls und der kontrollierten Desorption von Blei präpariert.

2.2 Auger-Elektronenspektroskopie

Analyse und Kontrolle der chemischen Zusammensetzung sind wesentliche Hilfen der Strukturbestimmung. Die Auswertung der Emissionselektronenspektren und der darin enthaltenen elementspezifischen Auger-Linien bietet die Möglichkeit sowohl qualitativer als auch quantitativer oberflächenempfindlicher chemischer Analyse.

2.2.1 Auger-Spektrometer

Um Verunreinigungen nachzuweisen und die Bleibedeckung zu bestimmen, wurde das LEED-Viergittersystem als Gegenfeldanalysator für Auger-Elektronen /26//27/ in der dazu üblichen Schaltung /28//29/ eingesetzt. (Eine Übersicht über Verfahren der Auger-Elektronenspektroskopie (AES) bieten z.B. /30//31//32//33/.) Eine feststehende Kanone lieferte 3keV-Primärelektronen bei Strahlströmen von 5 μ A bis 15 μ A und

unter 15 Grad Einfallswinkel zur Oberfläche. Vom Kristall emittierte Elektronen erzeugten diffuse Helligkeiten am Leuchtschirm, die zur Einjustierung des Primärstrahls ausgenutzt wurden. Mit einem elektrostatischen Ablensystem konnte der Strahl auf die Stelle des Kristalls gerichtet werden, die ein symmetrisches Schattenbild der LEED-Kanone auf dem Leuchtschirm ergab und damit die Übereinstimmung der Brennflecke beider Kanonen garantierte.

2.2.2 qualitative Auger-Analyse

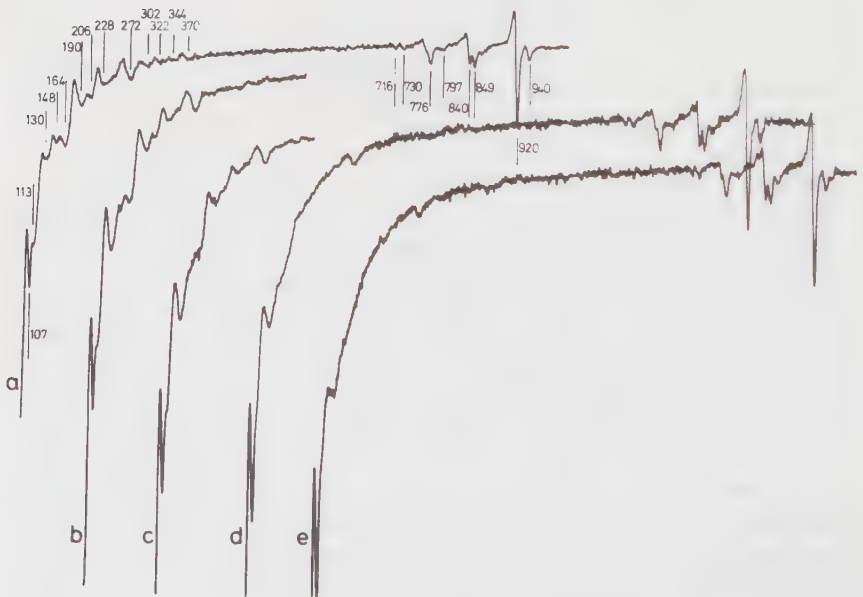
Während der Kristallpräparation wurden mit den Auger-Spektren Kontaminationen bestimmt, und ihre Beseitigung nachgewiesen. Unmittelbar nach Einbau des Kristalls in den Rezipienten zeigten sich die Auger-Linien von Schwefel und Kohlenstoff neben denen von Kupfer am stärksten ausgeprägt. Mit wachsender Zahl der durchgeführten Reinigungszyklen war die stete Abnahme dieser beiden Elemente von der Ausbildung eines Spektrums neuer Linien zwischen 100eV und 400eV begleitet (Abb.3). Eine Interpretation letzterer als Auger-Linien von Verunreinigungen erwies sich als inkonsistent, da alle Elemente, mit denen einzelne Linien erklärt werden können, intensivere, jedoch im Experiment nicht beobachtete Linien bei weiteren Energien zeigen. Die Intensitäten fielen, für Auger-Intensitäten anomal, stark mit zunehmender Temperatur und zeigten beim Aufheizen und Abkühlen des Kristalls keine beobachtbare Hysterese. Damit war auch einem Modell de- und adsorbierender Atome, im Gleichgewicht mit dem niedrigen Restgasdruck, widersprochen.

Die zusätzlichen Linien im Auger-Spektrum sind von McDonnell, Powell und Woodruff /34//35/ an Kupfer und Kobalt, und von Becker und Hagstrum /36/ an Nickel untersucht worden. (Die Linien werden von ersteren als 'temperature dependent peaks' bezeichnet.) Diese Autoren fanden eine exponentielle Temperaturabhängigkeit der Linienintensitäten, die mit der von LEED-Reflexen gleicher Energie gut übereinstimmt. Daraus schlossen sie, daß die zusätzlichen Elektro-

Experiment

Auger-Elektronenspektroskopie

nen nicht aus Auger-Prozessen stammen, sondern auf dynamische Beugungsphänomene zurückzuführen sind, die eine bevorzugte Emission von inelastisch gestreuten Elektronen spezieller Energien aus tiefliegenden Kristallschichten erlauben. Das Auftreten dieser Linien erst bei guter Ordnung des Kristallgitters und ihre nur schwache Abhängigkeit von Primärstrahlenergie und -einfallswinkel stützen diese Interpretation. Die Energieverschiebung der Linien von Nickel gegenüber denen von Kupfer läßt sich mit der verschiedenen Gitterkonstanten erklären /34/ und deutet ebenfalls auf Beugungseffekte als Ursache hin.



Experiment

Auger-Elektronenspektroskopie

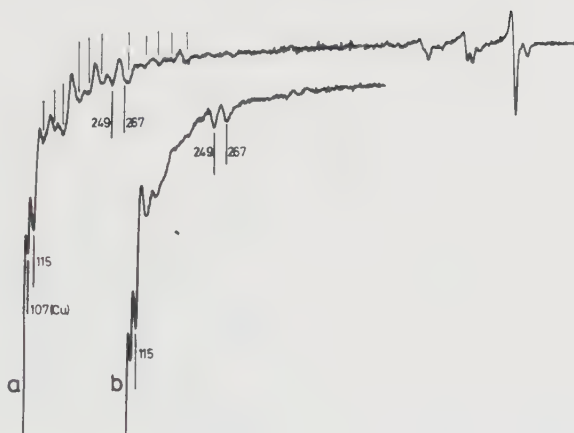


Abb.4, Auger-Spektren von $\text{Cu}(001)\text{-C}(5\sqrt{2}\cdot\sqrt{2})R45^\circ\text{-Pb}$ (100 eV-1000 eV):

Die Spektren wurden bei Kristalltemperaturen von 170K (a) und 480K (b) aufgenommen. Unter ihnen sind die Energien (eV) der Auger-Linien von Blei angegeben, und über der Kurve (a) sind die auch bei reinem Kupfer (Abb.3) beobachtbaren zusätzlichen Linien gekennzeichnet, deren Spektren durch das adsorbierte Blei nicht verändert werden. (Die Linie bei 115 eV wird Blei zugerechnet, obwohl sie nicht in Standardspektren angegeben ist. Ihre der Bedeckung proportionale Intensität, ihre schwache Erkennbarkeit bei /32/ und die Existenz einer äquivalenten Linie beim elektronisch fast identischen Wismuth /40/ rechtfertigen dies.)

Abb.3, Auger-Spektren von Kupfer:

Die Spektren wurden bei Kristalltemperaturen von 170K (a), 270K (b), 370K (c), 570K (d) und 770K (e) aufgenommen. Die Energien (eV) der Auger-Linien von Kupfer sind unter dem Spektrum (a) angegeben und stimmen gut mit Standardwerten /32//40/ überein. Über dem Spektrum (a) sind zusätzlich erscheinende Linien, deren Intensitäten eine starke Temperaturabhängigkeit zeigen, gekennzeichnet. (Die bei Raumtemperatur noch gut erkennbaren Linien bei 130 eV, 148 eV, 164 eV, 190 eV, 228 eV und 272 eV wurden auch von McDonnell et al. /34/ /35/ beobachtet.)

Die zusätzlichen Linien im Auger-Spektrum werden zwar als Indiz für die kristallographische Güte der Oberfläche angenommen /36//37/, erschweren aber die qualitative Analyse beträchtlich. Die Linien bei 150eV und 270eV koinzidieren mit den Auger-Linien von Schwefel und Kohlenstoff und machten zur Kontaminationskontrolle eine Aufheizung des Kristalls bis ca. 800K erforderlich. Bei dieser Temperatur werden einerseits die Beugungslinien weitgehend unterdrückt, andererseits desorbieren Schwefel und Kohlenstoff noch nicht, wie mit verunreinigter Fläche bestätigt werden konnte. Da Blei jedoch schon bei ca. 600K desorbiert, war eine Analyse der Bleischicht mit dieser Methode nicht möglich. Die Sauberkeit der Adsorbatstrukturen konnte nur durch den Vergleich mit Spektren reinen Kupfers bei niedriger Temperatur kontrolliert werden (Abb.4). Analog Schwefel auf Nickel /36/ wird das Spektrum der Beugungslinien auch von adsorbiertem Blei nicht merkbar verändert.

Mit Hilfe der quantitativen AES-Messungen am System Kupfer-Blei-Schwefel, die von Argile und Rhead /38/ mit einer vergleichbaren experimentellen Anordnung durchgeführt wurden, ist die maximale Schwefelbedeckung abschätzbar. Die beiden Autoren fanden ein Intensitätsverhältnis der Schwefel- und Kupfer-Linien von 0.15 bei ca. einer halben Monolage Schwefel. Für das gleiche Verhältnis kann bei allen hier durchgeführten Messungen eine obere Schranke von 0.003 angegeben werden, die folglich etwa dem hundertsten Teil einer physikalischen Monolage entspricht. (Unter einer physikalischen Monolage ist hier die dichteste Adsorbat-schicht zu verstehen, die in keinem rationalen Atomverhältnis zur obersten Substratschicht stehen muß.) Ein analoger Vergleich mit Messungen am System Nickel-Blei-Kohlenstoff, die von Oda und Rhead /39/ durchgeführt wurden, ergab eine Kontamination der Fläche von maximal einer fünfzigstel Monolage Kohlenstoff. (Die Nickel-61eV und die Kupfer-62eV Auger-Linien sind vergleichbar in Energie und Intensität /32//40/.) Wegen der schlechten Bestimmbarkeit der Auger-Linien bei niedriger Bedeckung können die genannten Werte nur eine obere Grenze der Verunreinigung angeben. Die LEED-Messungen gingen immer einer Aufnahme der Auger-Spektren vor-

aus, sodaß bei ersteren die präparierten Flächen sicher sauberer waren als hier angegeben. Ein Hinweis auf die Kontamination durch andere als die hier erwähnten Elemente wurde nicht gefunden.

2.2.3 quantitative Auger-Analyse

Eine vergleichende Auswertung der Auger-Spektren setzte die Konstanz sämtlicher apparativen Parameter voraus; die Einstellung der elektronischen Geräte und die geometrische Justierung des Kristalls wurden deshalb bei allen quantitativen Messungen beibehalten. Lediglich der Primärstrom war während der Meßreihen leicht instabil; um die Bedeckungsbestimmung von diesem unabhängig zu machen, wurde der Auger-Strom auf ihn normiert.

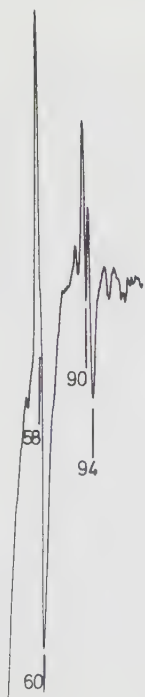


Abb.5, Auger-Spektrum von $\text{Cu(001)-C(5\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ - Pb}$ (50eV-100eV):
Die 58eV- und 60eV-Linien von Kupfer sowie die 90eV- und 94eV-Linien von Blei, die zur Bedeckungsbestimmung herangezogen wurden. (Zur Auflösung beider Bleiliniien war die Modulationsamplitude hier 2V_{SS}.)

Experiment

Auger-Elektronenspektroskopie

Zur Auswertung kam das Liniendublett von Blei bei 90eV und 94eV /32//40/ (Abb.5). Als der Bedeckung ansatzweise proportional angenommen wurde die Extremwertedifferenz der zweiten Ableitung des Emissionsstroms, die Linienhöhe der Spektren. Falls Adsorption nur in die oberste Schicht stattfindet, ist diese Annahme gerechtfertigt /41//42//43/.

Mit einer Modulationsspannung von 10V_{ss} an den Filternetzen konnte die Abhängigkeit des Auger-Stroms von Amplitudenschwankungen unterdrückt werden. (Bei Gegenfeldanalysatoren und Verwendung kleiner Modulation ist das Auger-Signal zum Quadrat deren Amplitude proportional, strebt aber bei großen Werten einer Konstanten zu /44/.) Der Rauschanteil des Auger-Signals wurde durch das mehrfache Wiederholen der Messung und Mittelung der Werte verringert, und mit deren statistischem Auswerten bestimmt; die Standardabweichungen blieben dabei unter 1%.

Um von den Auger-Daten auf die absolute Bedeckung schliessen zu können, war die Kenntnis der realen Bedeckung zumindest einer Struktur erforderlich. Mit der Cu(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Pb-Struktur, deren Bedeckung exakt 0.50 beträgt, konnte das Auger-Signal normiert werden. Von Vorteil war dabei, daß das Beugungsbild der ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur sehr empfindlich mit zusätzlichen Diffusitäten auf eine Änderung der Bleibedeckung reagierte. Ein mittlerer Fehler des Normierungsfaktors ergab sich aus dem mehrmaligen Züchten dieser Struktur und der dabei bestimmten Streuung der Auger-Daten.

Wegen einer möglichen Strukturabhängigkeit der Auger-Emission /45/ folgt die Linienintensität nicht unbedingt streng proportional der realen Bedeckung. Von einer solchen Abhängigkeit war aber nur ein langsam variierender systematischer Fehler zu erwarten, der sich bei den weiteren geordneten Strukturen als gegen den Meßfehler vernachlässigbar erwies (Abb.6). Dieses Ergebnis deckt sich mit den Abschätzungen von Sepulveda /16/, die ohne Berücksichtigung der ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur und des Ordnungsgrads der beobachteten Strukturen zustande kamen.

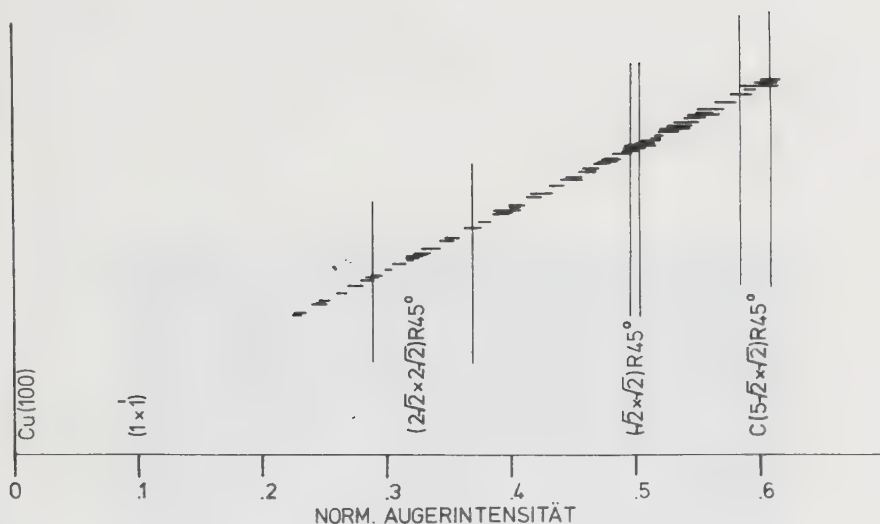


Abb.6, Bleibedeckung und Überstruktur:

Die gemessenen Auger-Linienintensitäten von Blei sind hier dargestellt, mit gekennzeichneten Bereichen, in denen geordnete Strukturen beobachtet wurden. Die Abszisse ist proportional der Auger-Intensität skaliert und mittels der $(\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur zur Bedeckung normiert. (Der angegebene Fehler ist durch das Rauschen des Auger-Signals und durch die Normierung mit einer nicht exakt definierten Auger-Intensität bedingt. Die Ordinate dient hier lediglich der Separierung der Fehlerbalken.)

2.3 Elektronenbeugung

Zur Untersuchung der atomaren Strukturen ebener Grenzflächen von Kristallen hat sich die Beugung mit nieder-energetischen Elektronen (Low Energy Electron Diffraction (LEED)) /3//46//47//48//49//50/ als hilfreiches und universelles Werkzeug erwiesen. Sie ermöglicht sowohl eine schnelle Abschätzung des Oberflächenzustands als auch die quantitative Analyse der Atompositionen und des Ordnungsgrads der Struktur.

2.3.1 Diffraktometer

In der üblichen Beugungsanordnung /50/ war ein Ausschnitt des reziproken Raumes auf dem Leuchtschirm des Viergittersystems darstellbar. (Eine Übersicht über das Verfahren bieten z.B. /33//51/.). Den Einsatz der Anordnung als Diffraktometer und die quantitative Erfassung der gebeugten Intensitäten ermöglichte ein um zwei Achsen schwenkbarer Faraday-Becher.

Verwendet wurde ein kompakter Kanonentyp mit nur drei Elektroden, der im Energiebereich von 20eV bis ca. 400eV eine ausreichend konstante Strahlgeometrie bei nur kleiner Divergenz gestattete. Um den auf dem Leuchtschirm beobachtbaren und dem Faraday-Becher zugänglichen Bereich des reziproken Raums zu erweitern, war die Elektronenkanone in einer waagrechten Ebene um den Kristall schwenkbar (Abb.7,8). Zur Optimierung der Wehnelt- und Linsenspannungen wurden die Primärstrahlbreiten mit dem Faraday-Becher bestimmt, und jene Einstellung beibehalten, die kleinste Halbwertsbreiten bei allen Energien ergab. Die Isolation der Kanone von der

Experiment
Elektronenbeugung

Rezipientenmasse ermöglichte eine ständige Messung des Primärstroms. Zur magnetischen Abschirmung bestand das Anodenrohr aus 'Mu-Metall', und der Kanonenkörper war mit einer Folie desselben Materials ausgekleidet.



Abb.7, Ansicht des Beugungsraums:
Der Kristallhalter hängt vor dem Vier-Gittersystem, mit dem (hier von ihm verdeckten) Kristall in dessen Zentrum. Die LEED-Elektronenkanone ist zur besseren Sichtbarkeit nach links geschwenkt, und rechts ist der Faraday-Becher, der vor dem Viergittersystem um den Kristall bewegt werden kann, erkennbar.

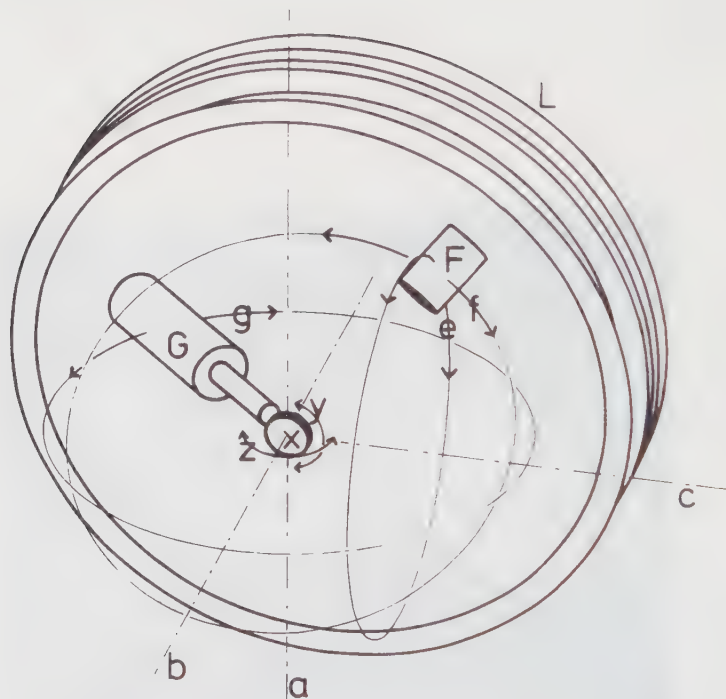


Abb. 8, Skizze der Beugungsanordnung:

Der Kristall (X) und die LEED-Elektronenkanone (G) können um die Achse (a) geschwenkt werden (g,z), und der Kristall ist zusätzlich um seine Oberflächennormale drehbar (y). Der Faraday-Becher (F) kann in Kleinkreisen (e um c) und in Großkreisen (f) auf einer sphärischen Fläche um den Kristall bewegt werden. Die Mittelpunkte der Kreisbewegungen (f,g,y und z) liegen an gleicher Stelle der Kristalloberfläche, und die Achsen (a) und (c) sowie die Symmetrieachse (b) des Viergittersystems (L) stehen senkrecht aufeinander.

Experiment

Elektronenbeugung

In der Streukammer störende Magnetfelder konnten mit Hilfe von Festmagneten und mit drei zueinander senkrechten Spulenpaaren kompensiert werden. Bei vertikalem Stahleinfall auf den Kristall wurde die Anordnung der Magneten und die Einstellung der Ströme so lange verändert, bis auch bei niedrigen Energien die Symmetrie des Beugungsbilds erhalten blieb.

Um jeden Reflex in eine gut beobachtbare Position bringen zu können, war der Kristall um zwei Achsen schwenkbar (Abb.8). Eine dieser Achsen stand senkrecht zu seiner Oberfläche, die zweite lag in der Oberfläche und parallel zur Schwenkachse der LEED-Kanone. Der Schnittpunkt beider fiel mit dem Mittelpunkt der Kristallfläche, denen der Kanonen- und Faraday-Becherschwenkung, sowie dem des Viergittersystems zusammen. Beim Einbau aller Komponenten wurden die geometrischen Justierungen mit Hilfe eines Lasers und verschiedener Lehren vorgenommen, festgehalten und bei den Messungen reproduziert.

Die Verwendung des Viergittersystems zur Auger-Elektronenspektroskopie bedingte Zahl, Anordnung und Dimension seiner Netze /26//27/. Zur Versteifung wurden die Netze nach dem Biegen beidseitig mit Gold bedampft, womit auch ihre Oxidation, die Ursache für elektrostatische Aufladungen, vermieden werden konnte. Mit den beiden mittleren Netzen wurden inelastisch gestreute Elektronen ausgefiltert, und zur Abschirmung des Beugungsraums war das innerste Netz geerdet. Bei Nachbeschleunigung der Elektronen auf 5keV lieferte der mit Zinksulfid beschichtete Leuchtschirm ein ausreichend helles Reflexbild.

Zur quantitativen Erfassung sowohl der Winkelverteilungen als auch der Integralwerte von Reflexintensitäten war ein um zwei Achsen schwenkbarer Faraday-Becher (Abb.7,9) im Beugungsraum installiert. Um eine Achse, senkrecht zur Kanonenschwenkachse, beschrieb der Faraday-Becher einen Kleinkreis im Ortsraum (Abb.8). Die zweite Achse, senkrecht zur ersten und mit dieser schwenkbar, ermöglichte die Bewegung des Bechers auf Großkreisen um den

Experiment
Elektronenbeugung

Kristall. Verschiedene Aperturblenden konnten vor die Becheröffnung geschwenkt werden; kreisförmige Blenden, mit 1.4, 2.7 und 5.5 Grad Öffnungswinkel (auf den Kristall bezogen), und zwei Schlitze 0.7 Grad mal 5.5 Grad, jeweils quer zu einer der Kreisbewegungen, standen zur Verfügung. Ein Netz im Becher filterte die inelastisch gestreuten Elektronen aus, und der Strom der elastisch gebeugten Elektronen war mit einem Picoamperemeter meßbar.

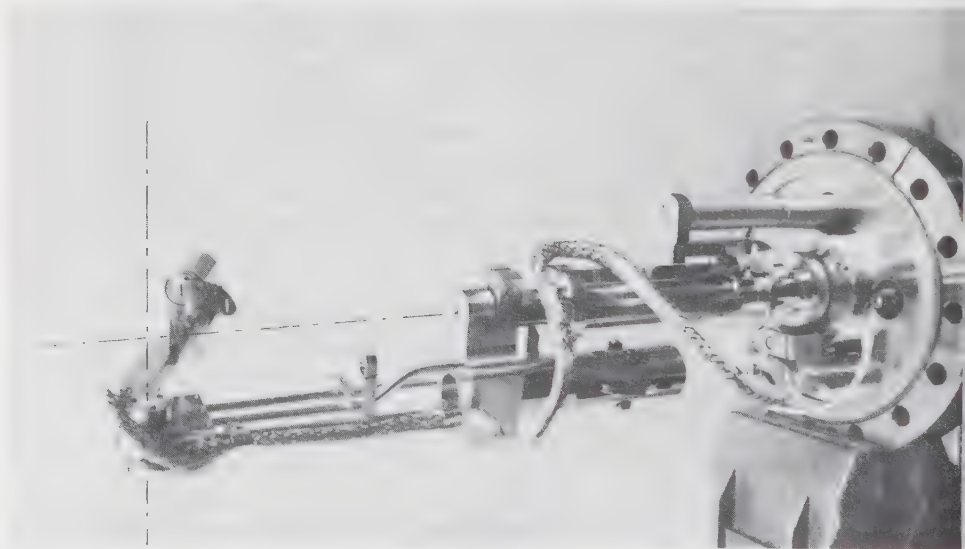


Abb.9, Ansicht des Faraday-Bechermanipulators:

Der Faraday-Becher ist links im Bild, auf dem Schwenkarm für die Großkreisbewegung erkennbar. Die Becheröffnung ist hier von einer der Schlitzblenden verdeckt, die in situ gegen die anderen Aperturblenden vertauscht werden kann. Der Schnittpunkt der Groß- und Kleinkreisachsen liegt in Höhe der Becheröffnung über dem Schwenkarm; im eingebauten Zustand befindet sich dort der Kristall.

Experiment

Elektronenbeugung

Alle quantitativen LEED-Messungen wurden von einem Rechner gesteuert, und die anfallenden Daten mit diesem gespeichert und weiterverarbeitet. Die Verbindung zwischen Rechner und Experiment war mit einem 'CAMAC'-Interface hergestellt, das die Prozeßsteuerung von 'Fortran'-Ebene aus ermöglichte. Eine schnelle Anpassung der Programme an die Meßprobleme war damit gewährleistet. Auf Programmbefehl wurde der Faraday-Becher um beide Achsen bewegt und die Primärstrahlenergie vorgegeben. Die Meßwerte von Energie und Strom des Primärstrahls, sowie die Kristalltemperatur und der in den Faraday-Becher gebeugte Elektronenstrom konnten gelesen und im Meßprogramm weiterverwandt werden. Ein Einsatz der Anordnung als vollautomatisches Diffraktometer war mit diesen Ein- und Ausgabedaten möglich.

2.3.2 Intensitätsmessungen

Der Vergleich von gerechneten und experimentell ermittelten Reflexintensitäts-Energie-Spektren hat sich bei der LEED-Oberflächenstrukturanalyse als aussagekräftiges Kriterium zur Beurteilung von Strukturmodellen erwiesen. Die Messung dieser Spektren erfolgte mit programmgesteuerter, schrittweiser Variation der Elektronenenergie. Synchron dazu wurde der Faraday-Becher an die berechneten Reflexpositionen gebracht, und dort die integrale Intensität mit der größten Aperturblende bestimmt. Nach einmaliger Einstellung des Faraday-Bechers auf den Reflex konnte dieser bei allen Energien sicher erfaßt werden. Zur Kontrolle war eine ganze Meßreihe auch mit veränderter Bechejustierung wiederholbar, und ein Auswertprogramm wählte die für jeden Energiebereich optimalen Meßwerte aus. Bei allen Wiederholungen ergaben sich jedoch nur geringfügige Abweichungen der Spektren.

Bei den Intensitätsmessungen wurde der Faraday-Becher um nur eine Achse geschwenkt. Der Kristall war dazu so orientiert, daß der zu messende Reflex bei allen Energien in der gleichen Großkreisebene der Faraday-Becherbewegung lag.

Experiment

Elektronenbeugung

Durch die Geometrie des Aufbaus bedingt, erlaubte diese Justierung eine größte Annäherung des Bechers an die Kanone und damit die Messung bis zu höchsten Energien.

Fast alle Messungen wurden bei senkrechtem Einfall des Strahls auf den Kristall durchgeführt. Um diese Beugungsgeometrie zu gewährleisten, wurden die Spektren des inversen Reflexes (des $(\bar{h}\bar{k})$ -Reflexes) bei unveränderter Justierung, sowie die der anderen symmetrisch äquivalenten Reflexe bei verdrehtem Kristall bestimmt, und durch den Vergleich der Kurven eine optimale Justierung ermittelt und überprüft.

Da bei Energien unter 50eV auf Grund von Störfeldern der exakt senkrechte Strahleinfall nicht mehr garantiert war, wurde auf diesen Energiebereich verzichtet. Die andere Grenze des Meßbereiches wurde mit 320eV angesetzt, da oberhalb dieser Energie die Überstrukturreflexe nur noch schlecht vom thermisch diffusen Untergrund unterscheidbar waren. Weiter wurde auf Energien verzichtet, bei denen der Ausfallswinkel der Strahlen 30 Grad unterschritt, und bei einigen Strahlen war die Maximalenergie durch die dichtestmögliche Annäherung des Faraday-Bechers an die Kanone vorgegeben.

Jeder elastisch gebeugte Elektronenstrom wurde mit dem Primärstrom zur Relativintensität normiert. Der Untergrund zu jedem Reflex wurde mit leicht verdrehtem Kristall, an einer zum (0 0)-Strahl äquidistanten Stelle zwischen den Reflexen ermittelt. Die Subtraktion des Untergrunds von der Intensität und eine Mittelung über alle symmetrisch äquivalenten Strahlen ergaben dann schließlich die Meßkurven, die mit den gerechneten Kurven verglichen werden konnten.

Wegen der hohen Intensität der (0 0)-Strahlen wurde für sie keine Untergrundbestimmung vorgenommen. Der Winkel zwischen Primärstrahl und Oberflächennormalen betrug 12 Grad bei Aufnahme ihrer Spektren. Zur Auswertung kamen die beiden symmetrischen Fälle mit jeweils einer der beiden nichtäquivalenten Spiegelebenen in der Beugungsebene.

Experiment

Elektronenbeugung

Mit der auf 120 Grad beschränkten Kristalldrehung waren nur zwei Drittel des reziproken Halbraums in der Großkreisebene des Faraday-Bechers zugänglich, und nicht jeder Strahl konnte mit allen symmetrisch äquivalenten gemittelt werden. Die Vielzahl der Reflexe machte Messungen an den Überstrukturen äußerst umfangreich und zeitaufwendig, weshalb bei diesen nur zwei äquivalente Strahlen zur Mittelung herangezogen wurden. Durch die Beibehaltung der an der Kupfer(001)-Fläche vorgenommenen Justierung erschien diese Beschränkung tolerierbar.

Obwohl keine Hinweise auf eine zunehmende Kontamination vorlagen, wurden die Flächen nach spätestens sechs Stunden wieder neu präpariert.

2.3.3 Profilmessungen

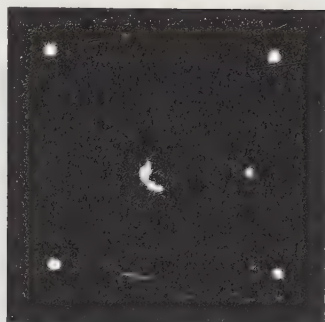
Mit den Schlitzblenden des Faraday-Bechers konnten Reflexprofile in Abhängigkeit der Elektronenenergie ermittelt werden. Programmgesteuert wurden die Elektronenenergien eingestellt und die Intensitäten an äquidistanten Punkten im reziproken Raum bestimmt. Unter Ausnutzung beider Schwenkachsen des Faraday-Bechers konnten Intensitätsverteilungen auch zweidimensional mit der Lochblende kleinster Öffnung abgerastert werden.

Teil 3

Ergebnisse

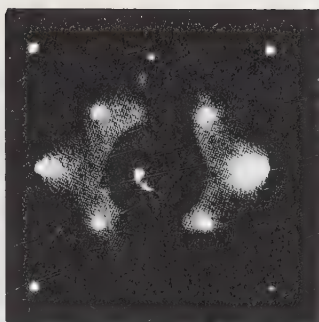
Blei bildet auf der (001)-Oberfläche von Kupfer eine Folge von Überstrukturen aus (Abb.10). Durch Bleiadsorption auf der sauberen Kupferfläche entstehen im Beugungsbild zusätzliche Reflexe einer $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur. Diese Überstrukturreflexe verlieren bei zunehmender Bleibedeckung wieder an Intensität; nur die halbzahligen Strahlen bleiben erhalten und weisen auf eine $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur hin. Durch weitere Bleiadsorption werden diese diffus, spalten in Satelliten auf, und eine Serie komplexer Reflexbilder entsteht. Das Beugungsbild einer $C(5\sqrt{2}*5\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur prägt sich schließlich aus und bleibt auch bei fortgesetztem Bedampfen der Fläche erhalten. Die an sauberem Kupfer(001) sowie den beiden dichten geordneten Strukturen erzielten Meßergebnisse werden im folgenden dargestellt und interpretiert. Auch war eine Deutung der Satelliten möglich, sodaß ein Modell des Strukturübergangs beschrieben werden kann. (Die weiteren Strukturen, die den hier gesetzten Rahmen sprengen, Blei bei sehr niedriger Bedeckung und Kupfer(001)- $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ -Blei, sind in den Anhängen D bzw. E skizziert.)

Ergebnisse

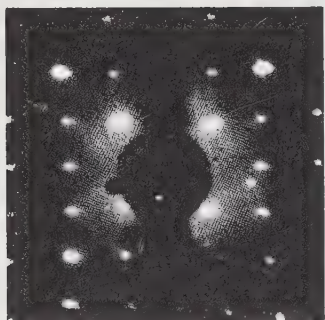


50 eV

Cu(001)

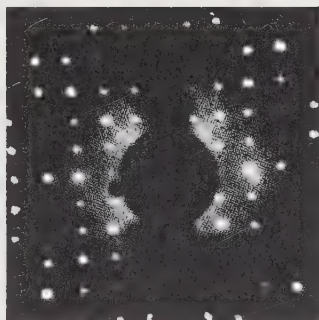


180 eV

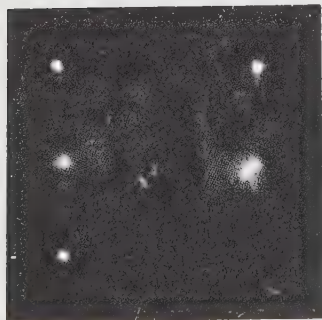


60 eV

$(2\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})R45^\circ$

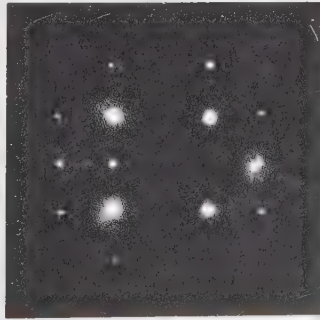


170 eV



60 eV

$(\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$



230 eV

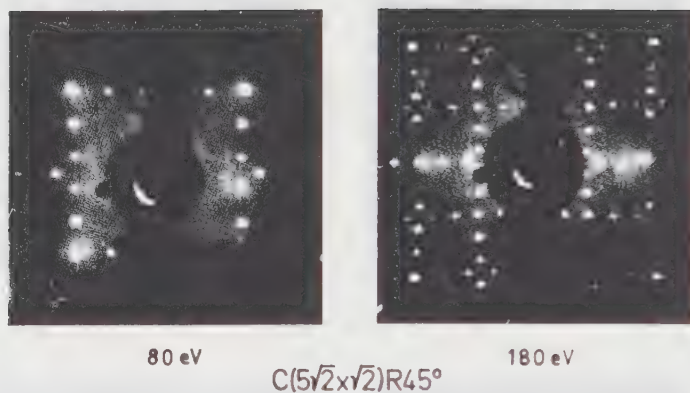


Abb.10, Beugungsbilder der geordneten Strukturen:

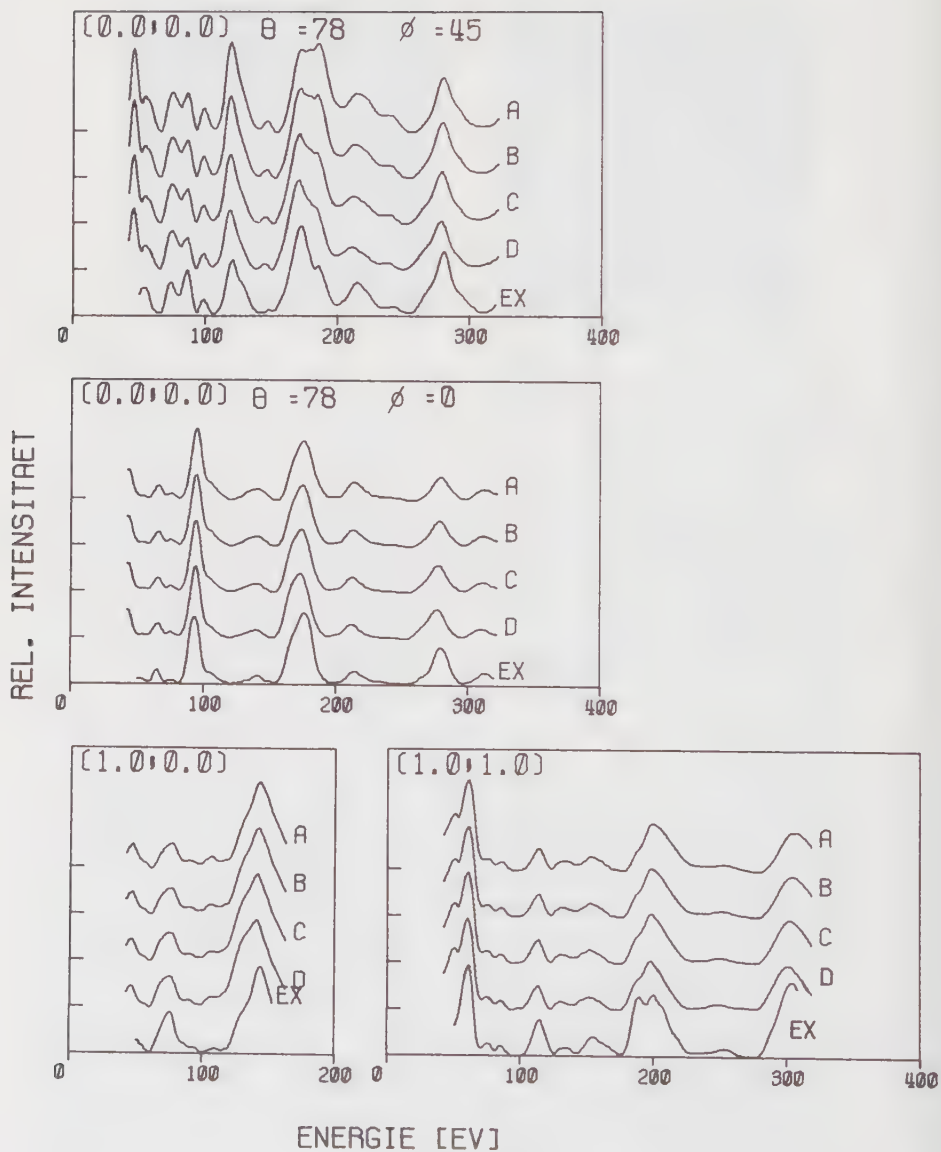
Bei jeweils zwei Energien und senkrechtem Strahleinfall aufgenommen. (Der in allen Bildern rechts der Mitte sichtbare helle Fleck stellt keinen Reflex dar, sondern ist durch einen Defekt des Leuchtschirms bedingt.)

3.1 Kupfer(001)

Obwohl die saubere (001)-Oberfläche von Kupfer zu den mit LEED genauest analysierten Strukturen zählt /4//52//53//54//55//56//57//58/, sind Intensitätsmessungen an ihr vorgenommen worden. Diese wurden verwendet, um die Beugungsanordnung, insbesondere den Kristall und das automatische Meßverfahren, zu testen und die Zuverlässigkeit der Methode, die Reproduzierbarkeit von LEED-Ergebnissen, zu überprüfen.

Nach erwähntem Verfahren wurden Meßkurven von 16 Strahlen zu sechs symmetrisch inäquivalenten Spektren gemittelt. Ein Vergleich mit den von Noonan und Davis /58/ sehr präzise gemessenen Spektren dieser Fläche ergab lediglich geringe Intensitätsdifferenzen, durch eine in beiden Experimenten verschiedene Kristalltemperatur bedingt. Ein Vergleich mit Modellrechnungen der Kupfer(001)-Fläche /59/, die unter Variation des inneren Potentials und des obersten Schichtabstandes durchgeführt wurden, ergab eine gute Übereinstimmung der Spektren und den gemittelten R-Faktor /60/ von 0.076. Die Einzelheiten der dynamischen Rechnungen sind in Anhang B wiedergegeben, Abbildung 11 zeigt die Meßergebnisse zusammen mit Kurvensätzen der Rechnungen, und Abbildung 12 gibt die Abhängigkeit des R-Faktors von innerem Potential und Schichtabstand wieder. (Der R-Faktor (reliability-factor) beschreibt die Diskrepanzen zwischen gerechneten und experimentell ermittelten Kurven. Bei nur geringer Ähnlichkeit ergibt er sich zu Werten über 0.50, und das angewandte Strukturmodell wird als falsch angesehen. Mit zunehmender Übereinstimmung der Kurven nimmt er ab; bei Werten um 0.35 wird ein Modell als wahrscheinlich und bei solchen unter 0.20 als zutreffend angesehen /60/. Identische Kurven ergeben einen verschwindenden R-Faktor.)

Ergebnisse
Kupfer(001)



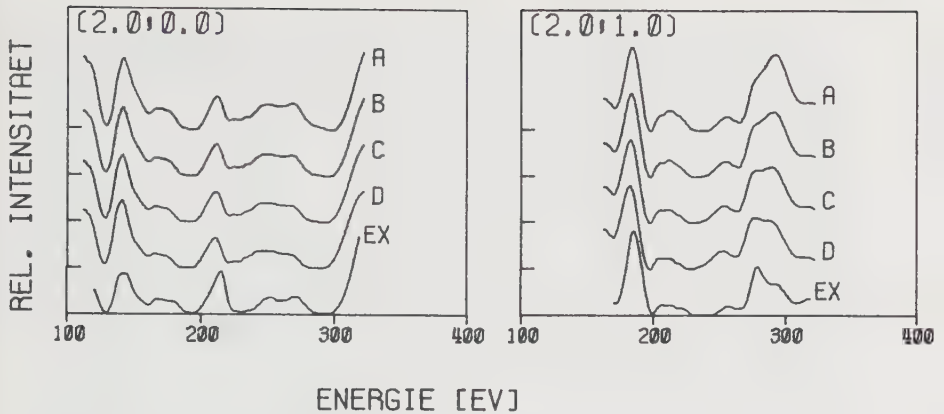


Abb. 11, Spektren von Cu(001):

Die Abstände der äußersten Schicht waren in den Rechnungen mit $1.7625\text{\AA}$ (A), $1.7775\text{\AA}$ (B), $1.7925\text{\AA}$ (C) und $1.8075\text{\AA}$ (D) angenommen. Die Kurven des (00)-Strahls wurden unter 78 Grad Primärstrahleinfallswinkel und bei zwei azimutalen Orientierungen der Fläche bestimmt; ϕ gibt den Winkel zwischen der Beugungsebene und der (110)-Ebene an. Minimale R-Faktoren und beste Übereinstimmungen mit den experimentellen Spektren (EX) ergeben die Kurvensätze (A) und (B). (Hier und in allen folgenden Darstellungen sind die theoretischen und die experimentellen Kurvensätze unabhängig voneinander skaliert.)

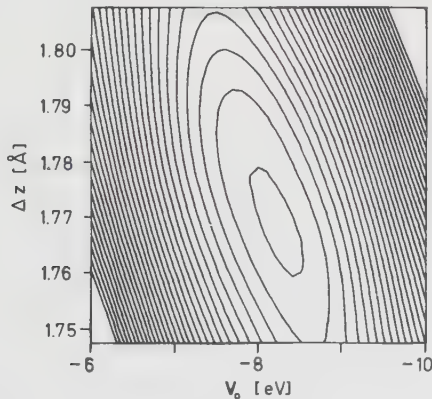


Abb. 12, R-Faktor von Cu(001):

Seine Abhängigkeit von Schichtabstand und innerem Potential. Die innerste Schichtlinie der Darstellung gibt einen R-Faktor von 0.077 wieder, und der Abstand der Linien beträgt 0.003. Das Minimum bei $1.77\text{\AA}$ zeigt zwischen den beiden obersten Kupferschichten eine Kontraktion von 2% an.

Ergebnisse
Kupfer(001)

Nachteil der üblichen, für die Oberflächenstrukturanalyse definierten R-Faktoren ist, daß alle Intensitätsspektren voneinander unabhängig skaliert, nicht aber, wie in der Röntgenstrukturanalyse, die absoluten Intensitäten unterschiedlicher Strahlen zu einem Vergleich ausgenützt werden. Zusätzliche Information ist deshalb in der Skalierung zwischen experimentellen und errechneten Intensitäten und insbesondere in der Streuung der Skalierungsfaktoren einzelner Strahlen enthalten. Ein konsistentes Strukturmodell sollte für alle Strahlen identische Skalierungsfaktoren liefern. Für die Kupfer(001)-Fläche lagen letztere zwischen 0.63 und 0.78 (0.63, 0.64, 0.74, 0.78, 0.64 und 0.71), wobei die Streuung der Werte auf die geringen Diskrepanzen der Kurvenformen, die sich auch im R-Faktor ausdrücken, zurückzuführen ist. (Als Skalierungsfaktor wurde hier der Quotient aus, im gemeinsamen Energiebereich integrierter, experimenteller und errechneter Strahlintensität verwandt.) Eine Abweichung vom Idealwert 1.0 kann mit Fehlstellen der Oberfläche qualitativ erklärt werden; die in die Rechnungen eingehende Näherung des Potentialverlaufs an der Grenzfläche zwischen Kristall und Vakuum wirkt sich jedoch noch zusätzlich auf die gebeugte Gesamtintensität aus, sodaß eine zuverlässige quantitative Interpretation nicht möglich ist.

Der hier zu 0.076 resultierende R-Faktor ist etwas schlechter als der von Noonan und Davis /58/ mit 0.044 erreichte. Ursache dafür sind die in beiden Analysen unterschiedlichen Näherungen des Streupotentials der Atome. Noonan und Davis testeten sechs verschiedene Potentialmodelle und wählten das mit den besten Ergebnissen aus; ein Aufwand der für das hier verfolgte Ziel nicht gerechtfertigt war. Läßt man noch R-Faktoren zu, die 5% über dem Minimalwert liegen, so ergibt sich das innere Potential zu -8.25 ± 0.6 eV und die Kontraktion des obersten Schichtabstandes zu $2.0 \pm 1.1\%$. Das innere Potential ist direkt vom Streupotentialmodell abhängig und deshalb in einem Vergleich wenig aussagekräftig. Die Kontraktion ist etwas stärker als die von Noonan und Davis zu $0.3 \pm 0.8\%$ bestimmte, liegt jedoch zwischen den Werten, die von beiden Autoren mit nicht optimalen Streuphasen ermittelt wurden.

Zusammenfassend ergibt sich für die saubere Kupfer(001)-Fläche eine gute Übereinstimmung von Experiment und Theorie, die den Rahmen absteckt, in dem die weiteren Ergebnisse zu sehen sind. Die Abhängigkeit des Strukturparameters von der Wahl der Streupotentiale und der zwar kleine, aber nicht vernachlässigbare R-Faktor zeigen die Grenzen auf, die einer LEED-Strukturbestimmung gegenwärtig gesetzt sind.

3.2 Kupfer(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° -Blei

Die ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur ist in einem nur sehr engen Bedeckungsbereich gut ausgeprägt (Abb.6). Bei etwas geringerer Bleibedeckung sind Reflexe der ($2\sqrt{2} \cdot 2\sqrt{2}$)R45°-Struktur sichtbar, und bei höheren Bedeckungen werden die Überstrukturreflexe schnell diffus. Der enge Stabilitätsbereich ist als Ursache anzunehmen, daß diese Struktur von anderen Autoren noch nicht beobachtet wurde.

Die ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur ist durch zwei zueinander senkrechte Translationsvektoren charakterisiert, deren Längen dem $\sqrt{2}$ -fachen des lateralen Substratomabstands entsprechen (Abb.13). (($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Strukturen werden oft äquivalent auch C(2*2)-Strukturen bezeichnet /61/.) Die Gitterkonstante übersteigt mit 3.615Å nur um 3.3% den Atomabstand massiven Bleis /62/, und die Überstrukturzelle ist von nur einem Adsorbatatom besetzt. Das numerische Verhältnis der Atome in den beiden obersten Schichten, die kristallographische Bedeckung dieser Struktur, beträgt damit exakt 0.50. Mit nur einem Adsorbatatom in der Zelle ist die ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur die einfachste Adsorbatstruktur des Systems und entspricht einer dilatierten (001)-Fläche von Blei, um 45 Grad verdreht gegenüber derjenigen von Kupfer. Als einfachste Überstruktur ist sie zur Anpassung der in die dynamischen Rechnungen eingehenden Parameter und zum Testen

Ergebnisse

Kupfer(001)- $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Blei

der Streuphasen von Blei geeignet.

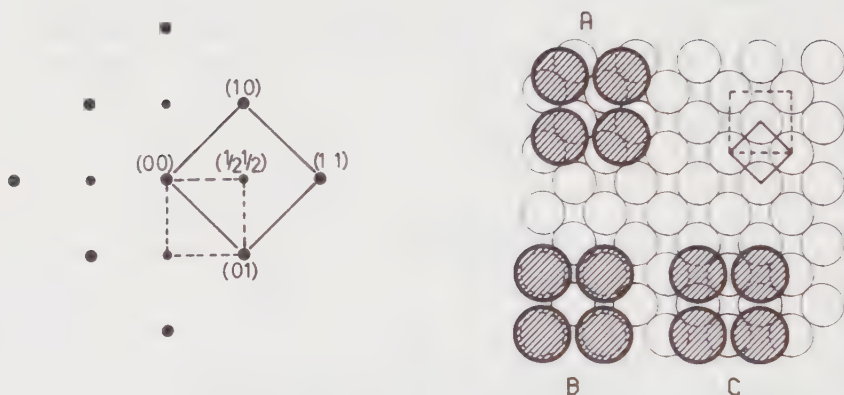


Abb.13, Beugungsbild und Modelle der $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur: Gezeigt sind reziprokes und reales Gitter mit den Zellen der Grund- und Überstruktur sowie Überstrukturmodelle mit Bleiatomen in einer der Sattellagen (A), in Scheitellage (B) und in Grubenlage (C). (Die Atomradien der jeweils reinen metallischen Bindung wurden in der Darstellung verwandt.)

Wird eine mit der 4mm-Symmetrie des Beugungsbildes identische Symmetrie der Überstrukturzelle angenommen, kann die Bleischicht zwei Lagen relativ zur obersten Kupferschicht einnehmen. Die Atome befinden sich dann entweder in der Grubenlage ('hollow site') mit der Blei-Kupfer-Koordination Vier, oder in der Scheitellage ('top site') mit der Koordination Eins (Abb.13). Die Symmetrie der Überstrukturzelle kann jedoch auch niedriger als die des Beugungsbildes sein, und letztere lediglich durch die Addition der Intensitätsbeiträge aller auf der hochsymmetrischen Fläche möglichen Orientierungen zustande kommen. Ein zweizähliges Überstrukturmodell, mit den Bleiatomen in der Sattellage

Ergebnisse

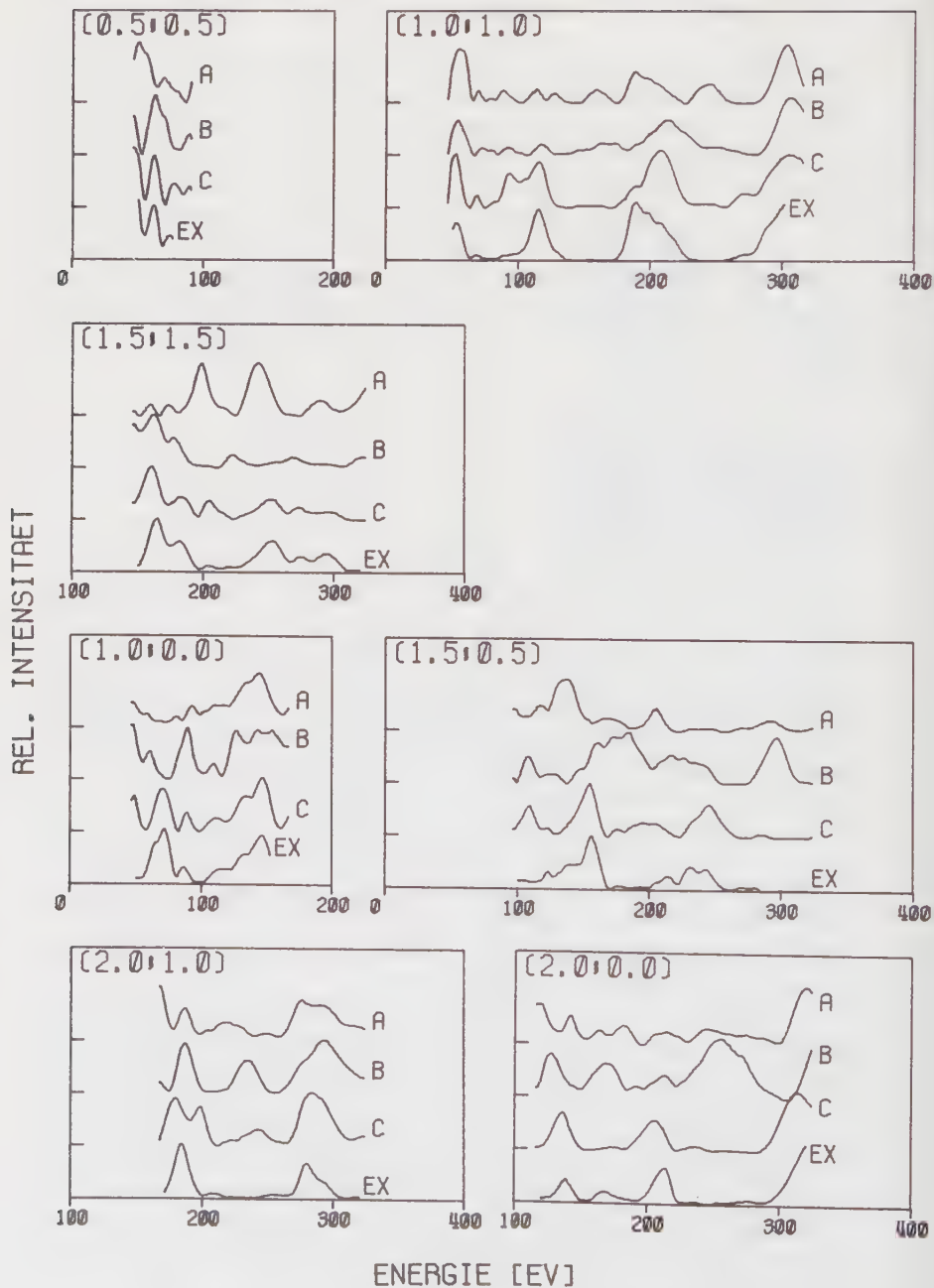
Kupfer(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° -Blei

('bridge site') und der Blei-Kupfer-Koordination Zwei, ist deshalb hier ebenfalls zu berücksichtigen. Auch kann eine weiter erniedrigte Symmetrie, mit vier bzw. acht gleichberechtigten Adsorptionsplätzen in der Zelle und der gleichen Anzahl möglicher Domänenorientierungen, nicht ausgeschlossen werden. Die Vielzahl der Lagen- und Domänenabfolgen läßt jedoch im letzten Fall eine Ordnung zu einer einfachen ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur unwahrscheinlich erscheinen. Da Rechnungen für niedersymmetrische Überstrukturzellen sehr aufwendig sind, wurde von den höhersymmetrischen Modellen als Ansatz ausgegangen.

20 Strahlen wurden gemessen, daraus neun nicht äquivalente, gemittelte Spektren erzeugt und mit gerechneten Kurven /59/ der zwei- und vierzähligen Modelle verglichen /63/. Bei den Rechnungen war die Debye-Temperatur von Kupfer mit 330K, die von Blei mit 70K angenommen und der Abstand der Bleischicht variiert worden. Eine für alle drei Modelle durchgeführte Analyse lieferte die jeweils minimalen gemittelten R-Faktoren. Das Minimum des R-Faktors der Sattellage ergab sich zu 0.34 bei 2.9Å, und das der Scheitellage zu 0.22 bei 3.0Å Schichtabstand. Der R-Faktor der Grubenlage, bei der die Skalierung zwischen gerechneten und gemessenen Intensitäten einheitlicheres Verhalten zeigte als bei den anderen Modellen, resultierte zu 0.17 bei 2.4Å Abstand der Adsorbatschicht. Die angezeigte Grubenlage wird durch den visuellen Vergleich der in Abbildung 14 dargestellten Spektren bestätigt.

Ergebnisse

Kupfer(001)-($\sqrt{2} \times \sqrt{2}$)R45°-Blei



Ergebnisse

Kupfer(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Blei

Abb.14, Spektren der ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Strukturmodelle:

Für die Strukturmodelle mit Atomen in Sattellage (A) bei 2.9Å, Scheitellage (B) bei 3.0Å und Grubenlage (C) bei 2.4Å Schichtabstand gerechnete Kurven im Vergleich mit den experimentell ermittelten Spektren (EX). Gezeigt ist der Kurvensatz jeden Modells, der bei Variation des Schichtabstands einen minimalen R-Faktor ergibt. Die Debye-Temperatur von Blei war hier mit 70K angenommen.

Eine für die Grubenlage durchgeführte Variation der Blei-Debye-Temperatur (Anhang C) ergab ein schwaches R-Faktorminimum von 0.16 bei 50K. Der Einfluß auf die Spektren ist jedoch zu gering, um daraus eine zuverlässige Oberflächen-Debye-Temperatur ableiten zu können. Eine Berücksichtigung der (0 0)-Strahlen bei schrägem Einfall verringerte den gemittelten R-Faktor weiter auf 0.15. Abbildung 15 zeigt den vollständigen Satz der Spektren dieses Modells, und Abbildung 16 gibt die Abhängigkeit des R-Faktors wieder. Die integralen Skalierungsfaktoren zwischen theoretischen und experimentellen Kurven liegen für die Grundstrukturstrahlen bei 1.0 (1.00, 1.01, 1.04, 1.36, 1.10 und 0.96), und für die Überstrukturstrahlen resultieren sie zu Werten um 0.5 (0.43 und 0.57). (Der (0.5 0.5)-Strahl wurde, auf Grund seines niedrigen und beschränkten Energiebereichs, in dem absolute Intensitäten nur unzuverlässig meßbar waren, hier nicht berücksichtigt.) Die unterschiedliche Skalierung der Strahlensätze ist mit Störungen der Überstruktur erklärbar. Insbesondere Antiphasendomänen, die bei dieser Struktur wahrscheinlich sind, führen zur Abnahme der mit begrenzter Faraday-Becheröffnung bestimmbaren Intensität von Überstrukturreflexen.

Ergebnisse

Kupfer(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Blei

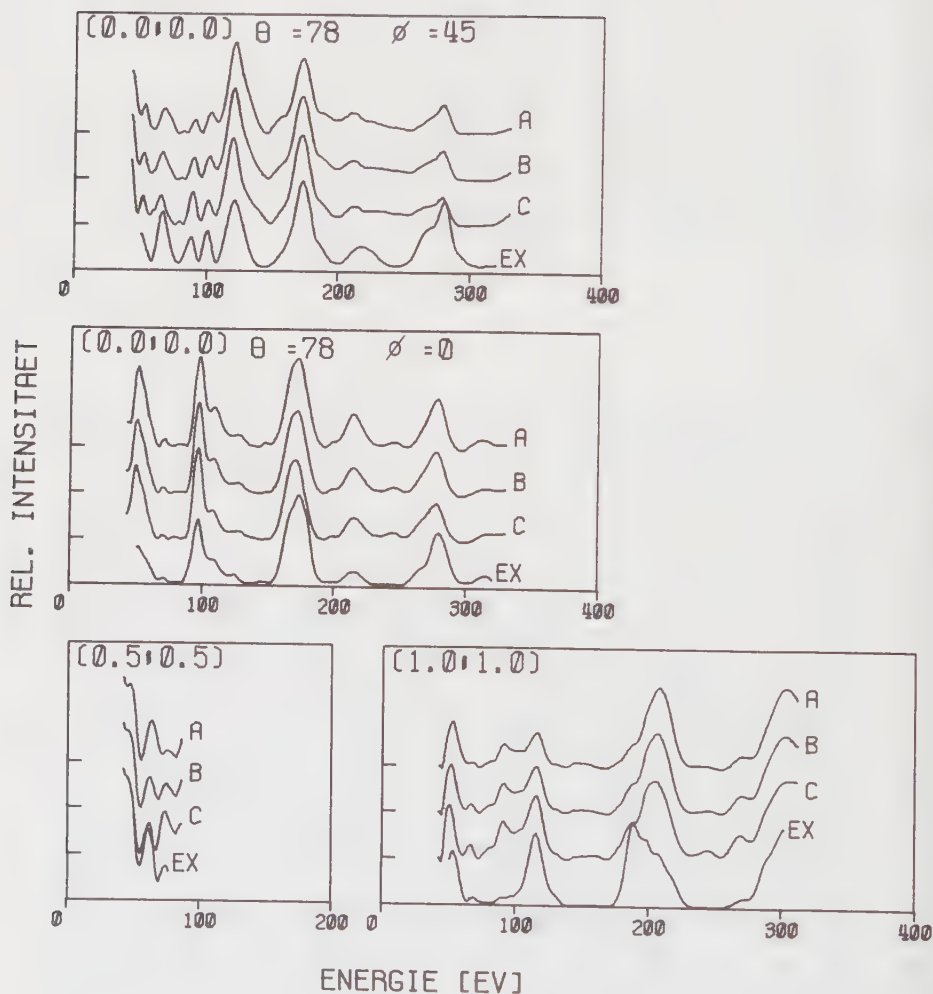
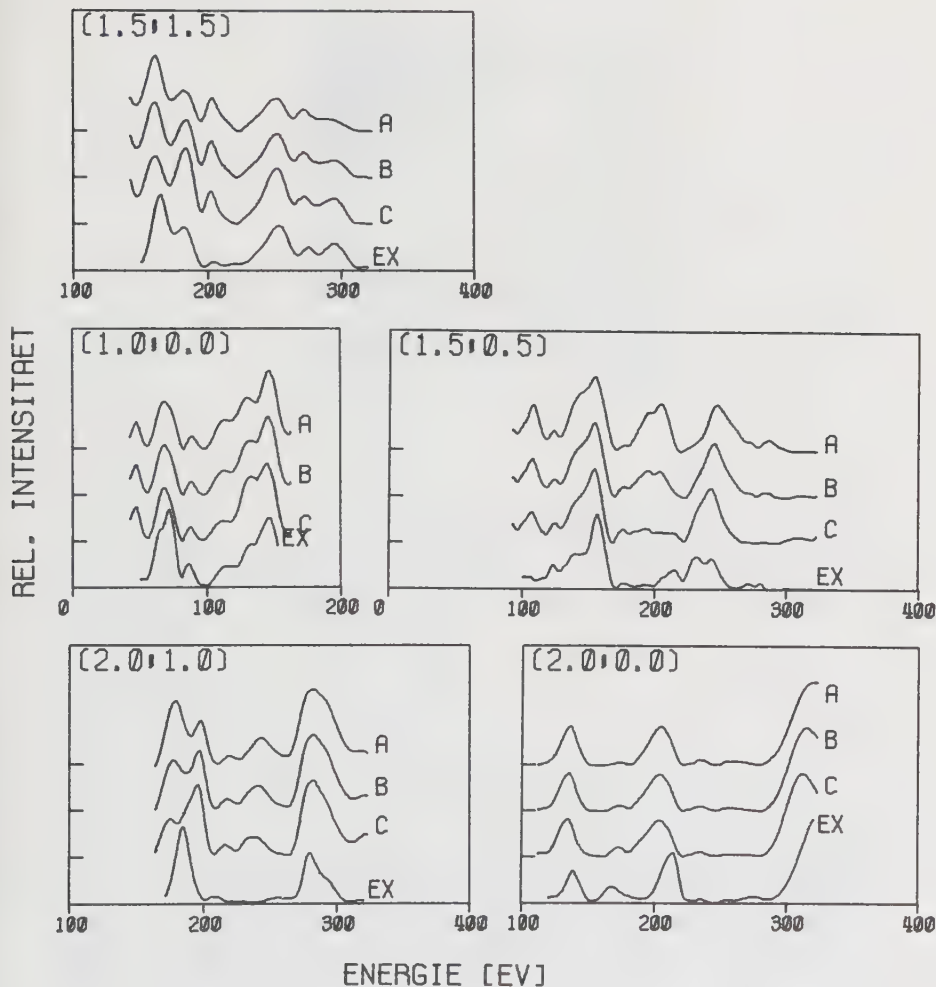


Abb.15, Spektren der ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur:

Alle gemessenen Strahlen (EX) im Vergleich mit den für die Grubenlage und 50K Blei-Debye-Temperatur gerechneten Kurven.

Ergebnisse

Kupfer(001)- $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Blei



Die Schichtabstände betragen $2.45\text{\AA}$ (A), $2.4\text{\AA}$ (B) und $2.35\text{\AA}$ (C), und der Kurvensatz (B) gibt den R-Faktor von 0.15, das Minimum dieser Strukturanalyse, wieder.

Ergebnisse

Kupfer(001) - $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ - Blei

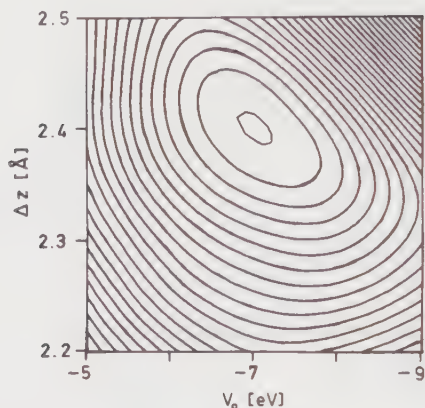


Abb.16, R-Faktor der $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur:

Seine Abhängigkeit von innerem Potential und Schichtabstand. Die innerste Schichtlinie entspricht einem R-Faktor von 0.15 und alle weiteren um jeweils 0.005 erhöhten Werten.

Auf Grund der Übereinstimmungen, die für das Modell der Grubenlage gefunden wurden, konnten die in den Rechnungen nicht berücksichtigten niedersymmetrischen Modelle ausgeschlossen werden. Der zu $2.40 \pm 0.06 \text{ \AA}$ resultierende Schichtabstand entspricht einem Blei-Kupfer-Atomabstand von $3.00 \pm 0.05 \text{ \AA}$, der der Summe beider metallischer Atomradien von $3.03 \text{ \AA}$ gleicht. Das innere Potential ergibt sich mit $-7.1 \pm 0.8 \text{ eV}$ zu einem etwas höheren Wert als bei reinem Kupfer; die Differenz ist durch das nicht optimal angepaßte Streupotential der Bleiatome, sowie durch die bei 0.5 eV liegende Austrittsarbeitsänderung /64/ bedingt.

3.3 Kupfer(001)-C(5 $\sqrt{2}$ * $\sqrt{2}$)R45°-Blei

Die dichte Monoschicht von Blei auf Kupfer(001) bildet eine von vielen Autoren /9//13//14//16//38/ beobachtete C(5 $\sqrt{2}$ * $\sqrt{2}$)R45°-Struktur aus. Im Vergleich zu beiden reinen Metallen zeigt die Schicht eine anomal niedrige Reaktivität gegenüber Sauerstoff und Schwefel /17//18/, und auf ihr adsorbieren bei Raumtemperatur keine weiteren Bleischichten; das aufgedampfte Blei bildet stattdessen dreidimensionale Mikrokristallite, die auch bei weiterem Bedampfen von der Monoschicht umgeben bleiben /13//16/ (Stranski-Krastanov-Wachstum /65/). Die sich aus den Linienintensitäten der Auger-Spektren ergebende Bedeckung von 0.6 (Abb.6) entspricht einer Besetzung der zentrierten Zelle mit sechs Bleiatomen. Die gute Korrelation der gemessenen mit der kristallographisch, auf Grund der Zellgröße nur möglichen Bedeckung (nächste Werte wären 0.4 und 0.8) bestätigt, daß Bleiatome nicht von darüber liegenden abgeschattet werden und daß diese Struktur die dichteste zweidimensionale Kompression des Adsorbats darstellt.

Das vierzählige Beugungsbild dieser Struktur (Abb.17) täuscht eine höhere Symmetrie vor, da alle auf der vierzähligen Fläche möglichen Orientierungen der Überstruktur zu ihm beitragen. Es läßt sich in zwei einfache Reflexsysteme mit jeweils cmm-Symmetrie unterteilen. Auch diese Symmetrie kann vorgetäuscht sein, sodaß die Symmetrie der Überstrukturzelle nur in einer Untergruppe der ebenen cmm-Symmetriegruppe darstellbar sein muß.

Ergebnisse

Kupfer(001)- $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Blei

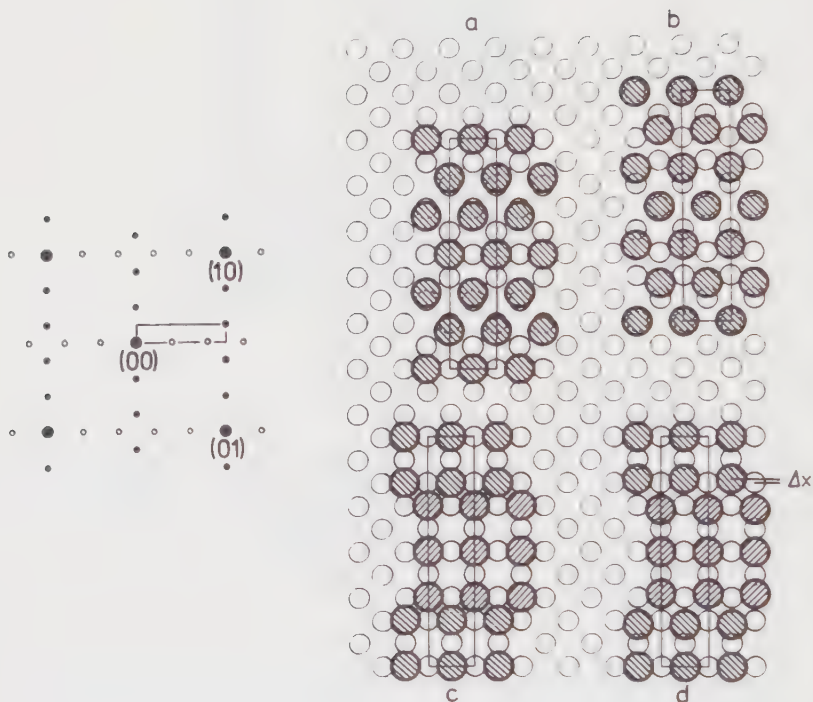


Abb.17, Beugungsbild und Modelle der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur: Gezeigt sind reziprokes und reales Gitter mit der zentrierten Zelle einer Domänenorientierung dieser Struktur. (Die Reflexe der zweiten Orientierung sind durch offene Kreise angedeutet.) Die Modelle (a) und (b) bestehen aus pseudo-hexagonalen Anordnungen von Bleiatomen. Das Modell (c) wird aus $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Lamellen mit regelmäßigen Antiphasengrenzen gebildet, und in Modell (d) sind zusätzlich die Atome der Domänengrenzen um Δx (hier mit $0.3\text{\AA}$ dargestellt) aus den Grubenlagen verschoben. Alle Modelle entsprechen einer cmm-Symmetrie und der Bedeckung von 0.6.

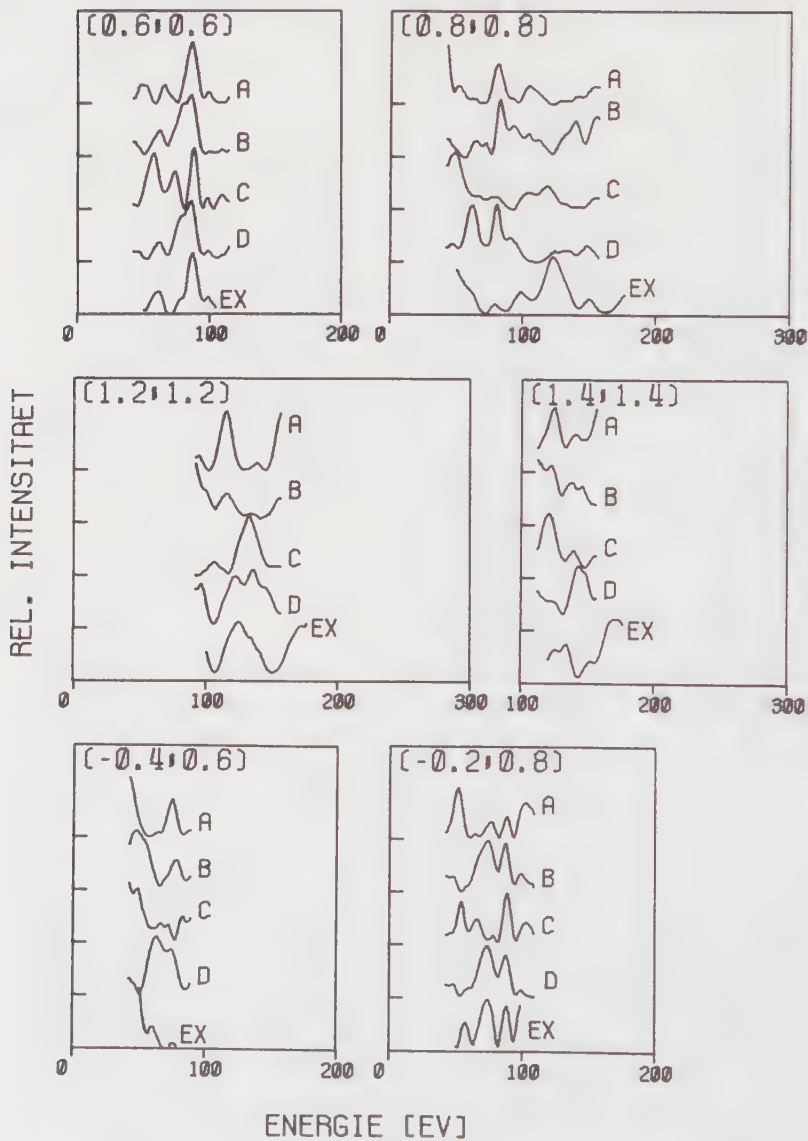
Henrion und Rhead /13/ schlugen eine pseudohexagonale Atomanordnung zur Erklärung der Überstruktur vor. Biberian und Huber /19/ bevorzugten hingegen das von Huber und Oudar /66/ vorgeschlagene high symmetry model, das alle Atome in identischen Adsorptionsplätzen annimmt und die Überstruktur mit regelmäßigen ($\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45°-Antiphasendomänen erklärt (Abb.17). Genannte Strukturvorschläge postulieren eine cmm-Symmetrie der Überstrukturzelle und sind die einzigen sowohl mit dieser Symmetrie als auch mit der gemessenen Bedeckung zu vereinbarenden Modelle /67/. Von ihnen wurde im weiteren ausgegangen. Rechnungen für Modelle mit niedrigerer Zellsymmetrie waren nicht möglich, da die Rechnerkapazität nicht zuließ. Im Falle niedrigerer Symmetrie erscheint jedoch eine statistische Verteilung der Orientierungen wahrscheinlich, sodaß eine Analyse dann die gemittelte Struktur liefert und den höhersymmetrischen Ansatz rechtfertigt.

3.3.1 'pseudohexagonales' Modell

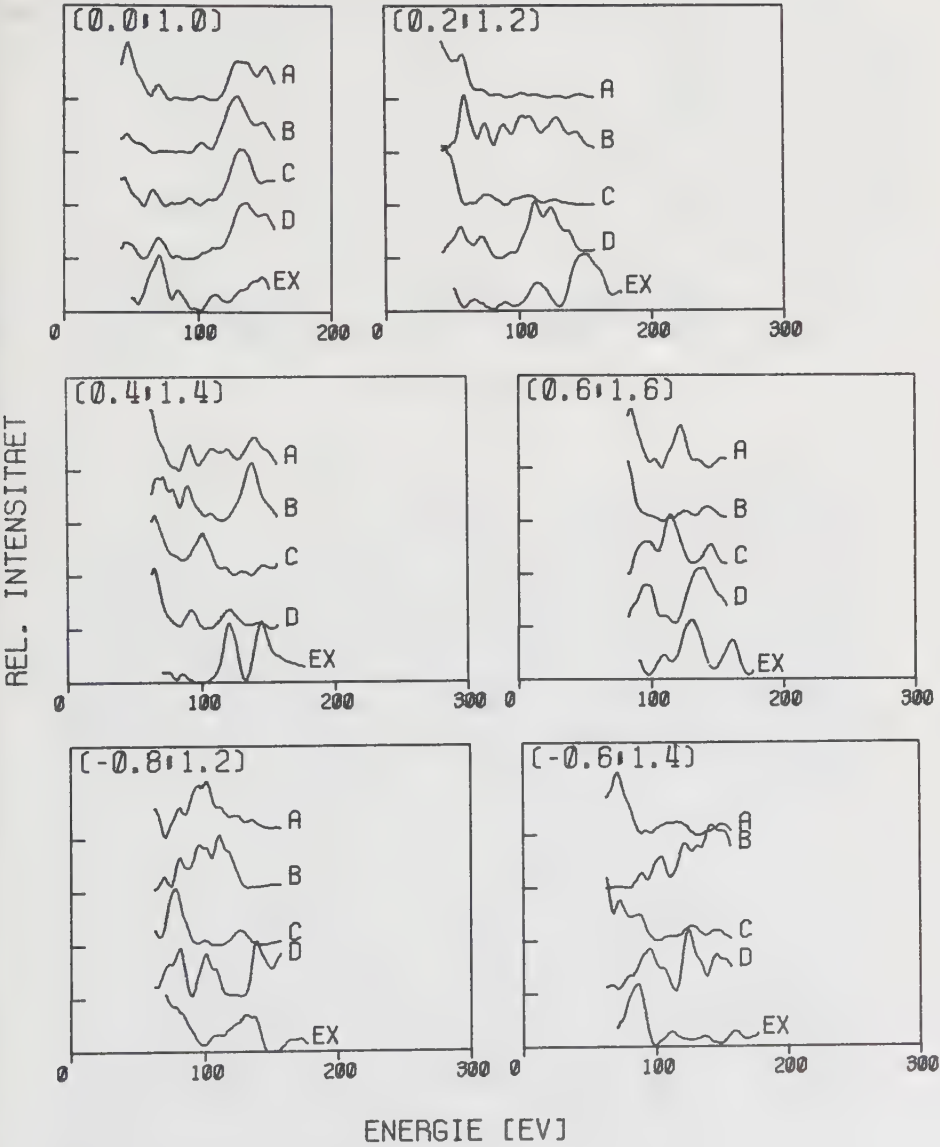
Eine leicht verzerrte, dichtest gepackte Adsorbatschicht mit der Blei-Blei-Koordination Sechs (Blei(111), der dichtesten Fläche des Metalls, ähnlich) entspricht der geforderten Bedeckung und ist in zwei Modellen mit einer cmm-Symmetrie der Überstrukturzelle vereinbar. Im ersten Modell nimmt jedes dritte der Bleiatome die Grubenlage ein; im zweiten befindet sich jedes dritte in der Scheitellage, und die anderen annähernd in der Grubenlage (Abb.17). Unter Beibehaltung der Symmetrie bleiben der Schichtabstand und die Wellung der Schicht sowie ein lateraler Kettenabstand als noch freie Strukturparameter. Im Falle ebener Adsorbatschicht und äquidistanter Atomketten ist der Abstand zwischen nächsten Bleiatomen nur um ca. 0.4% größer als in massivem Blei. Obwohl keine hexagonale Symmetrie vorliegt werden diese Modelle, unter Bezugnahme auf die Koordination, oft als 'hexagonale' Überstruktur bezeichnet. Zu ihrer Kennzeichnung wird hier der Ausdruck 'pseudohexagonal' verwandt.

Ergebnisse

Kupfer(001)-C(5 $\sqrt{2}$ * $\sqrt{2}$)R45°-Blei



Ergebnisse
Kupfer(001)-C(5√2*√2)R45°-Blei



Ergebnisse

Kupfer(001)- $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Blei

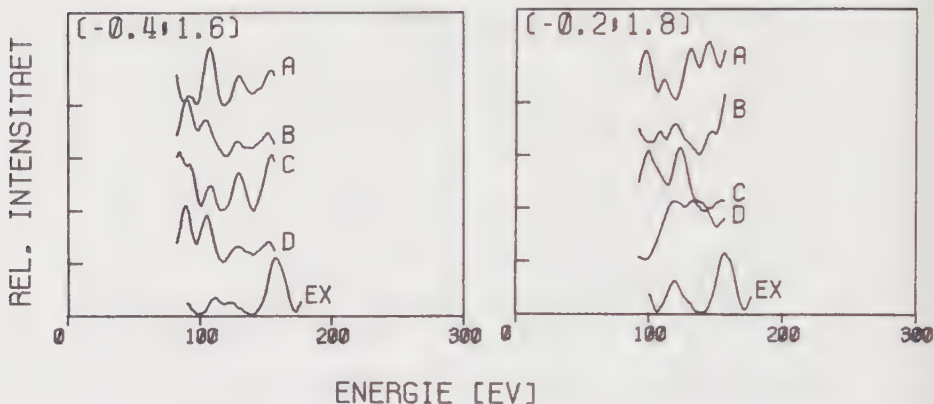


Abb.18, Spektren pseudoexagonaler Modelle der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur:

Die Spektren (A) und (B) sind für das erste Modell in Abbildung 17, mit jedem dritten der Bleiatome in Grubenlage, und für eine $0.55\text{\AA}$ gewellte (A) bzw. ebene Schicht (B) gerechnet worden. Rechnungen für das zweite Modell, mit jeder dritten Atomkette in Scheitellage, und $0.25\text{\AA}$ gewellter und ebener Schicht geben (C) und (D) wieder. In den Rechnungen wurde der Abstand der Bleischicht variiert, und die dargestellten Kurven aller Modelle entsprechen einem Minimum des R-Faktors, das jedoch in keinem Fall unter 0.50 liegt. Auch ein visueller Vergleich läßt keine Ähnlichkeit eines der Kurvensätze (A-D) mit dem Experiment (EX) erkennen.

Die Rechnungen /59/ der beiden pseudoexagonalen Modelle wurden für laterale Äquidistanz der Ketten und unter Variation des Schichtabstandes durchgeführt. Mit den Metallradien errechnete sich für das erste Modell eine Wellung von $0.55\text{\AA}$ und für das zweite eine von $0.25\text{\AA}$. Wegen der Grobheit dieses Ansatzes wurden in zwei weiteren Modellen auch ebene Adsorbatschichten angenommen. Auf Grund des großen Strahlensatzes der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur und der begrenzten Kapazität der Rechenanlage mußte der gerechnete Energiebereich auf unter 160eV beschränkt bleiben. Nach dem

Ergebnisse

Kupfer(001)-C($5\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45° -Blei

beschriebenen Verfahren wurden gemittelte und untergrundkorrigierte experimentelle Spektren von 14 Strahlen bestimmt und mit den theoretischen Kurven verglichen. Alle ebenen und gewellten pseudohexagonalen Modelle (Abb.18) ergaben gemittelte R-Faktoren über 0.50 /63//68/, und ein visueller Vergleich bestätigt das Fehlen jeglicher Ähnlichkeit zwischen experimentellen und theoretischen Kurven. Von einer noch mit der Modellvorstellung einer dichtesten Kugelpackung im Einklang bleibenden Parametervariation wurde keine wesentliche Verringerung des R-Faktors erwartet, und von weiteren Rechnungen für die pseudohexagonalen Modelle deshalb abgesehen.

3.3.2 'Lamellen'-Modell

Verbleiben alle Atome in den Grubenlagen der ($\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45° -Struktur, so ist durch das Einfügen dicht besetzter Antiphasendomängengrenzen die Bedeckung über den Wert 0.5 hinaus steigerbar. Ein Modell der ($5\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45° -Struktur kann somit aus der regelmäßigen eindimensionalen Abfolge von Domänen konstruiert werden /19/ (Abb.17). Da diese ($\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45° -Domänen sehr schmal und langgestreckt sind, werden sie hier, in Anlehnung an das dreidimensionale Analogon, als Lamellen bezeichnet. An den Lamellengrenzen ist eine Adsorption exakt in benachbarte Grubenlagen auf Grund der Größe der Bleiatome unwahrscheinlich, und eine Verrückung der Bleiatome von den Grenze zur Lamellenmitte hin muß deshalb in den entsprechenden Strukturmodellen berücksichtigt werden. (Die Rechnung unter Annahme aller Atome in Grubenlage führt, wie erwartet, zu einem R-Faktor von 0.68.) Die von den Grenzen ausgehenden Spannungsfelder setzen sich dann in das Innere der Lamellen fort, wirken abstoßend, verhindern die Unterschreitung einer minimalen Breite und erklären die Ordnung der Überstruktur. Mit der Lateralverschiebung verbleiben der Schichtabstand und die Wellungsamplitude als noch freie Strukturparameter. Etliche Rechnungen /59//63//68/ sind für das Lamellen-Modell durchgeführt worden, unter Veränderung dieser Parameter zur

Ergebnisse

Kupfer(001)-C($5\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45°-Blei

sukzessiven Erniedrigung des R-Faktors. Sein dabei beobachtetes Verhalten, sowie die Parametersätze, die sein Minimum ergaben, werden im folgenden dargestellt. Ein Zulassen von R-Faktoren, die bis zu 5% über dem Minimalwert liegen, führte zu den angegebenen Fehlergrenzen.

Minimale R-Faktoren ergaben sich für Adsorbatatome, die $0.34 \pm 0.04 \text{ \AA}$ aus den Grubenlagen der Lamellengrenzen verdrängt sind (Abb.19). Diese Lateralverschiebung kommt dem Wert von $0.42 \text{ \AA}$, den ein Modell äquidistanter Bleiatome liefert, nahe. Die Wellung resultierte zu ca. $0.04 \text{ \AA}$, mit einer Aufbuckelung der Lamellengrenze (Abb.20). Der Abstand zwischen oberster Kupferschicht und nächstem Bleiatom ergibt sich zu $2.26 \pm 0.04 \text{ \AA}$ (Abb.21), und ist damit geringer als der bei der ($\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45°-Struktur gefundene. Sowohl die lateralen Atomabstände, als auch der Schichtabstand lassen auf einen ca. 10% geringeren Bleiradius als in massivem Blei schließen.

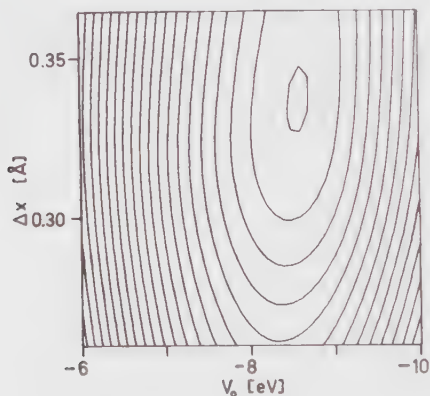


Abb.19, R-Faktor der C($5\sqrt{2}*\sqrt{2}$)R45°-Struktur, Lateralparameter:

Bei einem Abstand von $2.4 \text{ \AA}$ der $0.05 \text{ \AA}$ gewellten Bleischicht gibt die innerste Linie den R-Faktor von 0.27, und alle weiteren um 0.01 erhöhte Werte wieder. Das Minimum zeigt eine laterale Verschiebung der Bleiatome von $0.34 \pm 0.04 \text{ \AA}$ aus den Grubenlagen der Domänengrenzen an.

Ergebnisse

Kupfer(001)-C(5 $\sqrt{2}$ * $\sqrt{2}$)R45° -Blei

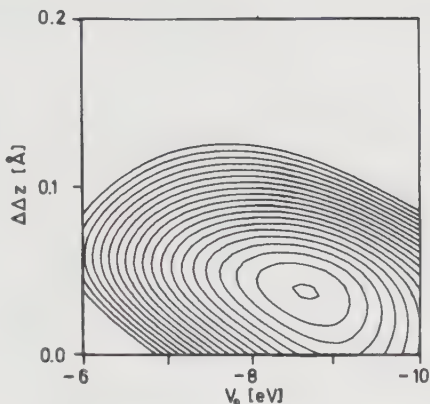


Abb.20, R-Faktor, Wellung:

Die Lateralverschiebung beträgt hier 0.31Å und der Schichtabstand 2.3Å. Die innerste Linie entspricht einem R-Faktor von 0.27, und der Linienabstand beträgt 0.01. Eine Wellung von 0.04+0.03Å wird durch das Minimum wiedergegeben.

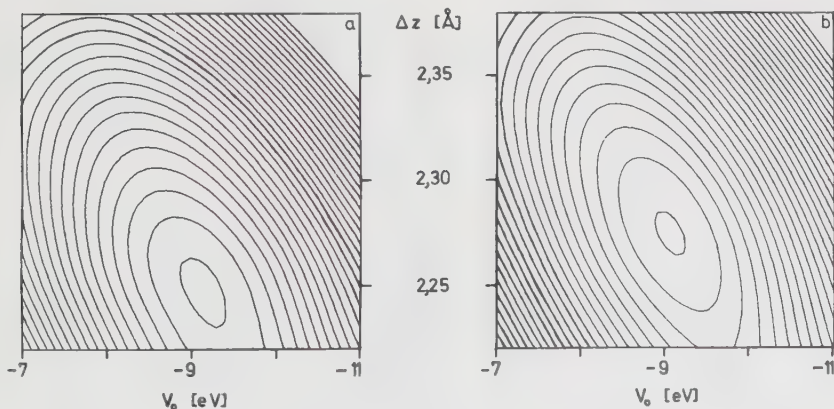
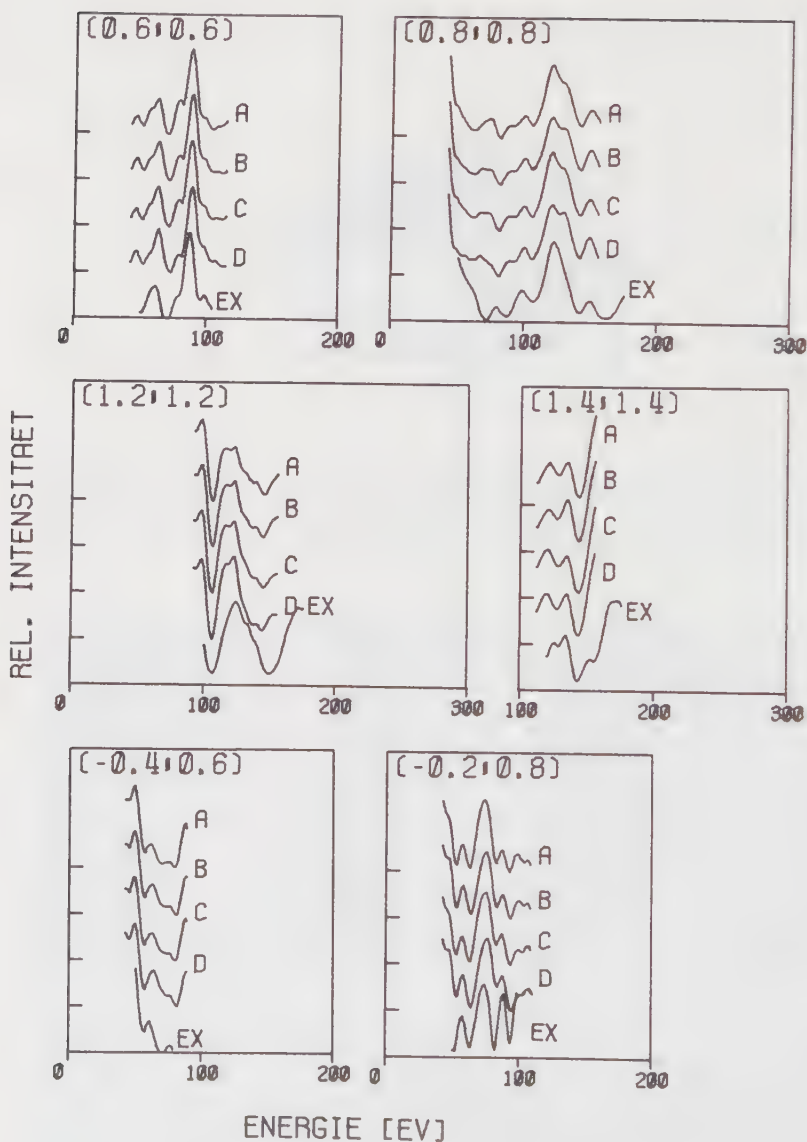


Abb.21, R-Faktor, Schichtabstand:

Die R-Faktoren der Kurvensätze meiste Übereinstimmung bei 0.36Å lateraler Verschiebung und 0.05Å Wellung (a), bzw. 0.33Å Verschiebung und 0.03Å Wellung (b). Die innersten Linien geben R-Faktoren von 0.25 bzw. 0.24 wieder und zeigen einen Abstand der Bleischicht von 2.26+0.04Å an.

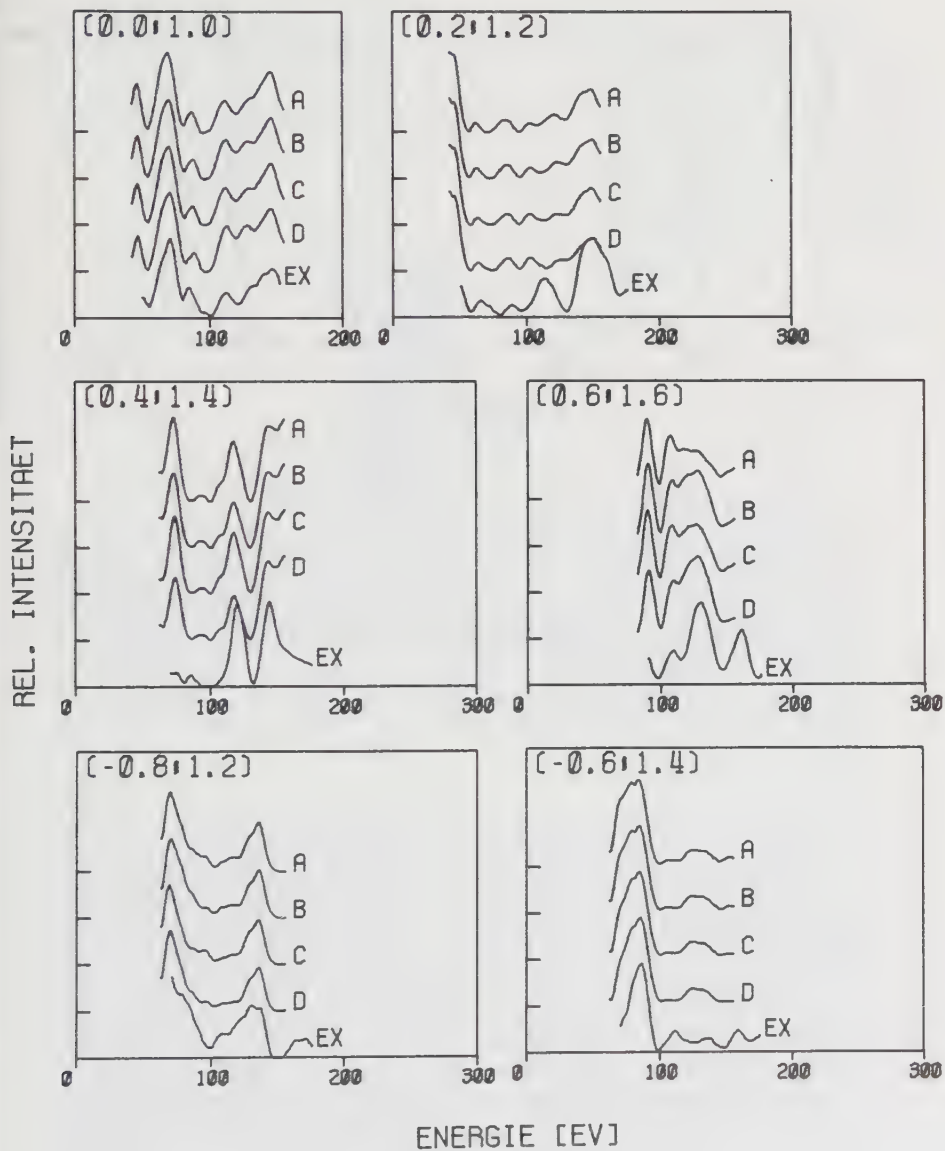
Ergebnisse

Kupfer(001)-C($5\sqrt{2} \times \sqrt{2}$)R45°-Blei



Ergebnisse

Kupfer(001)- $C(5\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ -Blei



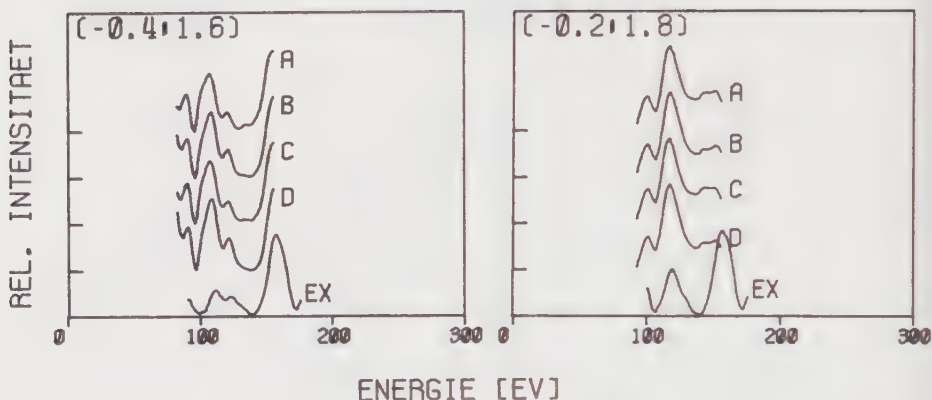


Abb.22, Spektren der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur:

Gezeigt sind die gerechneten Spektren meistar Übereinstimmung mit den experimentellen (EX). Die Kurvensätze sind für Lateralverschiebungen Δx von $0.34\text{\AA}$ (A,B) und $0.36\text{\AA}$ (C,D), Wellungen von $0.03\text{\AA}$ (A,B) und $0.05\text{\AA}$ (C,D) sowie für Schichtabstände von $2.30\text{\AA}$ (A), $2.26\text{\AA}$ (B,C) und $2.22\text{\AA}$ (D) gerechnet. Die minimalen R-Faktoren ergeben sich zu 0.25 (C) bzw. 0.24 (B).

Die Spektren bester Übereinstimmung (Abb.22) ergaben R-Faktoren um 0.25, Werte, die durch weitere Parameteranpassung nicht mehr verbessert werden konnten. Die Skalierungsfaktoren zeigten ein den individuellen R-Faktoren der Strahlen analoges Verhalten; für die Überstrukturstrahlen guter Übereinstimmung lagen sie einheitlich bei Werten von 0.4; für die Strahlen, deren R-Faktoren den Wert 0.2 überstiegen, wiesen die Skalierungsfaktoren eine breite Streuung auf. Eine systematische Abhängigkeit von der Reflexlage war dabei nicht erkennbar. Der Skalierungsfaktor des Grundstrukturreflexes lag bei 0.78, sodaß die resultierenden Werte mit denen der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur vergleichbar sind. Wie bei dieser, kann auch bei der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur die unterschiedliche Skalierung der Strahlensätze mit der Fehlordnung

Ergebnisse

Kupfer(001)- $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Blei

der Adsorbatschicht erklärt werden. Die Ursache noch verbleibender Diskrepanzen der Spektren ist aber nur teilweise in Baufehlern der Struktur zu suchen, sie liegt auch in der zu geringen Anzahl verwendeter Streuphasen, die durch die Rechnerkapazität vorgegeben war.

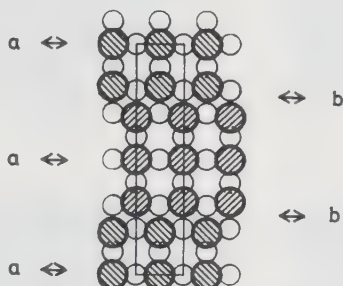


Abb.23, Symmetrieeerniedrigtes Modell der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur:

Die angedeuteten Verschiebungen (a) oder (b) der Adsorbatatomketten vernichten die cmm-Symmetrie der Überstrukturzelle und konnten deshalb bei der Strukturanalyse nicht berücksichtigt werden. Die Verschiebungsbeträge können jedoch nur gering sein, da beide Verschiebungen zu einem der pseudohexagonalen Modelle führen (Abb.17), die ausgeschlossen werden mußten.

Gleichfalls Ursache der Diskrepanzen zwischen theoretischen und experimentellen Spektren kann eine in den Rechnungen nicht berücksichtigte erniedrigte Überstruktursymmetrie sein. Prinzipiell ist jede beliebige Atomverschiebung, bei der die primitive Überstrukturzelle beibehalten wird, mit dem Reflexmuster des Beugungsbildes vereinbar. Jedoch lassen der für die Komplexität der Struktur recht geringe R-Faktor sowie sein deutlich ausgeprägtes Minimum große Abweichungen von beschriebenem cmm-symmetrischen Modell unwahrscheinlich erscheinen. Die aus den angegebenen Atompositionen resultierenden Blei-Blei-Abstände sind ca. 10% geringer als in massiven Blei, sodaß Veränderungen, die zu einer lokal noch dichteren Packung der Adsorbatatome führen, mit großer Wahrscheinlichkeit ausgeschlossen werden können.

Mit diesen Einschränkungen vereinbar bleiben zwei symmetrierniedrigende Verschiebungen von Bleiatomketten parallel der Lamellengrenzen (Abb.23). Da beide zur Annäherung an eines der pseudohexagonalen Modelle, die verworfen werden mußten, führen, können die Verschiebungsbeträge nur gering sein.

3.4 Kupfer(001)- $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Blei

Intermediäre Bleibedeckungen, zwischen denen der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ - und der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur, waren im Beugungsbild an diffusen Reflexmustern erkennbar (Abb.24). Die schwache Ordnung und die angedeuteten großen Überstrukturen verhinderten die Analyse dieser Zwischenstrukturen mittels dynamischer Rechnungen. Der Bedeckungsbereich zwischen 0.5 und 0.6 ist jedoch eng, und die beiden ihn begrenzenden geordneten Strukturen zeigen Gemeinsamkeiten, die zu einem Modell des Strukturübergangs verhelfen können. Im nachfolgenden wird deshalb versucht die analysierten geordneten Strukturen mit einer qualitativen Auswertung der Beugungsbilder aller Zwischenzustände zu einem konsistenten Bild zu kombinieren.

Abb.24, Beugungsbilder des Strukturübergangs:

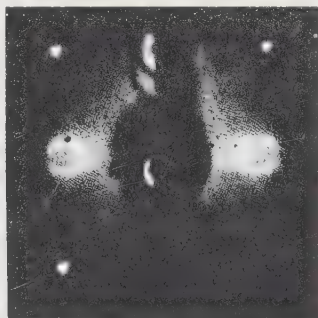
Die Folge (a-d) zeigt drei Grundstrukturreflexe sowie die Intensitätsverteilungen um zwei halbzahlige Positionen bei Energien von 48eV. Die entsprechende Bleibedeckung ist unter jedem Bild angegeben. In (a) ist der (0.5 0.5)-Strahl stark anisotrop verbreitert, (b) gibt die Aufspaltung dieses Strahls in Satelliten wieder, und in (c) sind diese Satelliten leicht nach außen gewandert. Die Reflexe der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur beginnen in (d) zusätzlich sichtbar zu werden. (e) und (f) zeigen die schon in (b) wiedergegebenen Satelliten bei Energien von 40eV und 130 eV, und bei um 45 Grad verdrehtem Kristall.

Ergebnisse

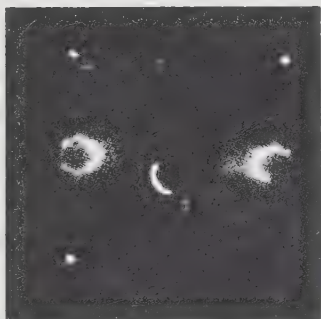
Kupfer(001)-($(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$)-Blei



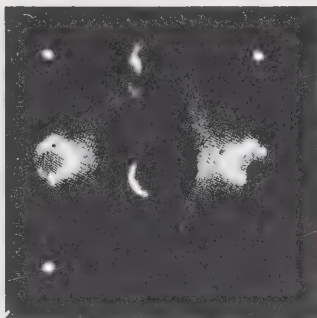
a (0.52-0.53)



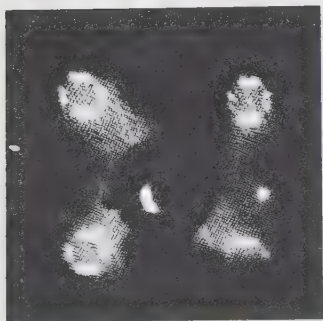
b (0.54-0.55)



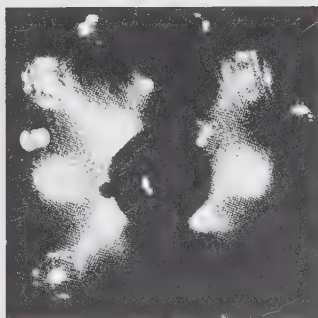
c (-0.57)



d (0.58-0.59)



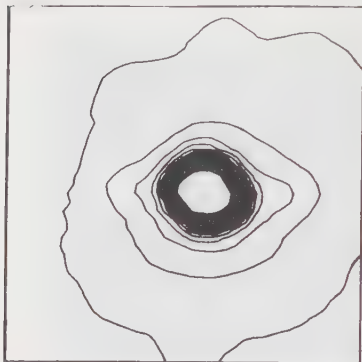
e (-0.54)



f (-0.54)

Ergebnisse

Kupfer(001)-(($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° bis C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°)-Blei



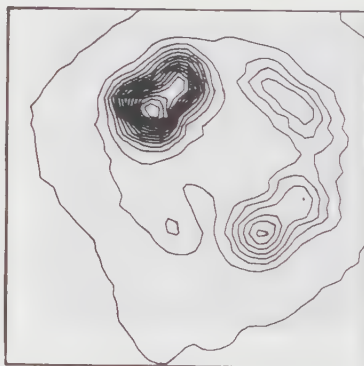
a (0.5)



b (-0.52)



c (-0.53)



d (-0.54)



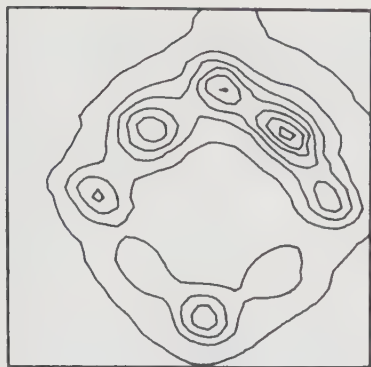
e (-0.54)



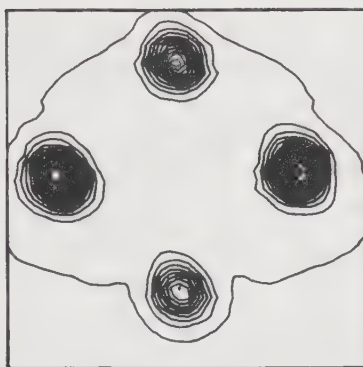
f (-0.57)

Ergebnisse

Kupfer(001)-(($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° bis C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°)-Blei



g (-0.58)



h (0.6)

Abb.25, Strukturübergang, Intensitätsverteilung um (0.5 0.5):

Die Intensitäten wurden mit dem Faraday-Becher bei den angegebenen Bedeckungen abgerastert, und die Folge zeigt den Übergang von der ($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur (a) zur C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Struktur (h). Jede Darstellung gibt einen quadratischen Ausschnitt aus dem reziproken Raum wieder, und die Kantenlänge beträgt $0.3 \cdot \sqrt{2}$ reziproke Einheiten. In (e) sind (0.533 0.600) und die dazu 4mm-symmetrisch äquivalenten Positionen um (0.5 0.5), und in (f) sind (0.610 0.512) sowie die dazu äquivalente Lagen gekennzeichnet. In der (010)-Substratspiegelebene, die senkrecht durch jede Darstellung verläuft, wurde unter 70 Grad mit Elektronen der Energie 100eV eingestrahlt.

Wegen der Komplexität dieser Strukturen mußte auf eine Untersuchung verschiedener Ordnungszustände, in Abhängigkeit ihrer Genese, verzichtet werden; immer wurde ein möglichst geordneter Endzustand angestrebt. Die Strukturen wurden durch Abdampfen von Bleiatomen bei ca. 650K bis zur beabsichtigten Bedeckung, und nachfolgendem langsamen Abkühlen auf 160K erzeugt. Von einer vermehrten Diffusität des Beugungsbildes abgesehen, zeigten sich sowohl bei höheren Temperaturen als auch bei schnellerem Kühlen keine neuen Merkmale.

Ergebnisse

Kupfer(001)-($(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$)-Blei

Die Beugungsbilder aller Zwischenstrukturen bilden um die halbzahlige indizierbaren Positionen intensive Charakteristika aus. Um (0.5 0.5) mit dem Faraday-Becher abgerasterte, zweidimensionale Intensitätsverteilungen sind in Abbildung 25 dargestellt.

Die halbzahligen Strahlen der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur blieben bis zu Bedeckungen von ca. 0.53 noch sichtbar, verloren bei wachsender Bedeckung jedoch an Intensität und zeigten breiter werdende anisotrope Schultern. Bei Bedeckungen um 0.54 waren die halbzahligen Reflexe ausgelöscht, und um ihre Positionen hatten sich äquidistant vier Satellitenpaare gebildet. Satelliten geringerer Intensität waren in einem hohen Untergrund auch um die Hauptreflexe, in etwa verdoppeltem Abstand und gleicher Richtung, erkennbar. Auf dem verwendeten Kristall zeigte diese Struktur eine auffallende Intensitätsasymmetrie; insbesondere in den Isointensitätsdarstellungen ist die (010)-Spiegelebene des Substratkristalls nicht erkennbar. Sowohl um alle halbzahligen Positionen als auch um die Hauptreflexe zeigen zwei Satellitenpaare höhere Intensität als die anderen beiden. Diese Asymmetrie war nicht durch einen asymmetrischen Primärstrahleinfall bedingt, wie durch Schwenken des Kristalls überprüft werden konnte, sie zeigt sich auf der ganzen Kristallfläche und war nach erneutem Bedampfen reproduzierbar. Bei steigender Bedeckung schmierten die Satellitenpaare zu ovalen Reflexen, in geringfügig vergrößerten Abständen von den halbzahligen Positionen, aus. Diese Intensitätsverteilung wies bei Bedeckungen um 0.57 die (010)-Spiegelebene wieder auf und ließ keine Asymmetrie mehr erkennen. Scharfe Reflexe der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur entstanden bei weiter zunehmender Bedeckung und wurden intensiver, während die diffusen Merkmale an Intensität verloren und im Untergrund aufgingen.

Von energieabhängigen, durch dynamische Effekte bedingten Intensitätsunterschieden abgesehen, waren bei festgehaltener Bedeckung alle Maschen des reziproken Netzes identisch, und die Satelliten höchster Intensität konzentrierten sich immer um die halbzahligen Positionen. Beides deutet

Ergebnisse

Kupfer(001)-($(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$)-Blei

auf $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Antiphasendomänen hin, die auch die $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur bilden, und mit deren An- bzw. Umordnung damit der ganze Bedeckungsbereich von 0.5 bis einschließlich 0.6 beschreibbar wird. Wie auch bei der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur finden die zur $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur zusätzlich adsorbierten Atome an den Antiphasengrenzen Platz, und die Bedeckung bestimmt die Häufigkeit dieser Antiphasengrenzen.

$(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Antiphasendomänen bewirken eine Aufspaltung der halbzahligen Reflexe in Satelliten; wesentliches Kennzeichen ist, daß die ganzzahligen Strahlen keine Aufspaltung zeigen. Die hier dennoch um die Grundstrukturreflexe beobachteten schwachen Satelliten sind auf eine an die Domänenabfolge gekoppelte Variation der Formfaktoren zurückzuführen (Anhang G). (Durch die Vielfachstreuung bedingt sind die Streubeiträge von der Umgebung der Einzelstreucentren abhängig, sodaß für die Domänengrenzen andere Formfaktoren als für deren Mitten gelten.) Die Fehlordnung der Zwischenzustände führt zu einer Verbreiterung der Satelliten, die mit dem Abstand von den halb- und ganzzahlig indizierten Positionen zunimmt und mit dazu beiträgt, daß nur erste Satelliten um diese Lagen erkennbar bleiben (Anhang H).

Eine breite statistische Verteilung der Domänengrößen bewirkt bei Bedeckungen zwischen 0.5 und ca. 0.53 eine Verbreiterung des (0.5 0.5)-Strahls, jedoch noch keine Aufspaltung dieses Überstrukturreflexes /69/. Auf Grund der hohen Fehlordnung und des geringen Streubeitrags der wenigen Domänengrenzen sind in diesem Stadium weder Diffusitäten noch Satelliten um die Grundstrukturreflexe erkennbar. In der Anisotropie der Intensitätsverteilung zeigt sich die Dominanz einiger Orientierungen der Grenzen an, die sich in den Satellitenmustern bei höheren Bedeckungen weiter ausprägt.

Ab Bedeckungen von ca. 0.54 weisen die vollständige Auslöschung des (0.5 0.5)-Strahls und der schmale Ring, auf dem die Satelliten liegen, auf das Vorherrschen auch fester Abstände zwischen den Domänengrenzen hin. Obwohl dieser

Ergebnisse

Kupfer(001)-($(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$)-Blei

Ring und, bei spezieller Bedeckung, auch die ihn bildenden Satelliten schmal erscheinen (ihre Halbwertsbreiten sind mit denen von geordneten Überstrukturen vergleichbar), zeigen Diffusitäten im Beugungsbild, insbesondere um die Grundstrukturreflexe, die Fehlordnung der Domänenstruktur an. Die im weiteren dargestellten, den Intensitätsverteilungen um (0.5 0.5) entsprechenden, idealisierten Domänenmodelle können deshalb nur qualitativ eine mittlere Anordnung wiedergeben.



Abb.26, Domänenanordnung des Strukturübergangs (I):

Gezeigt sind das Substratgitter, mit idealisierten Domänen einer der beiden Antiphasenlagen, sowie eine Masche des reziproken Netzes dieser Anordnung, mit Satelliten in (0.533 0.600) und den äquivalenten Positionen. (Hier ist nur eine von zwei möglichen Orientierungen dargestellt. Die zweite wird durch Spiegelung an einer Substratspiegelebene erzeugt.) Diese Domänenanordnung entspricht zwar der in Abbildung 25e dargestellten Intensitätsverteilung, die reale Struktur kann jedoch noch erhebliche Abweichungen aufweisen. Die hier dargestellten Domänen können an den Eckpunkten zu lamellenartigen Anordnungen verwachsen, ohne daß dies an den Satellitenlagen erkennbar wird, und die Fehlordnung, die alle Übergangsstrukturen zeigen, wurde hier nicht berücksichtigt.

Ergebnisse

Kupfer(001)-($(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$)-Blei

Bei Bedeckungen um 0.54 liegen acht Satelliten in (0.600 0.533) und den dazu 4mm-symmetrisch äquivalenten Lagen um die halbzahligen Positionen. Ein Domänensystem, mit dem sie vereinbar sind, gibt Abbildung 26 wieder. Die bei diesen Satelliten beobachtete Intensitätsasymmetrie (die beschriebene, in der Intensitätsverteilung nicht enthaltene Substratspiegelebene) ist mit dem schachbrettartigen Modell dieser Abbildung scheinbar nicht vereinbar. Dieses kann jedoch, durch vielfältiges Zusammenwachsen gleichartiger Domänen an den Kreuzungspunkten der Domänengrenzen, Charakteristika einer lamellenartigen Anordnung annehmen und dadurch die Asymmetrie der Satellitenintensitäten erzeugen. Aus den Beugungsbildern kann letztlich nur auf die mittlere Größe und relative Lage der Antiphasendomänen geschlossen werden; eine Analyse der Anordnung deren Grenzen macht die präzise Auswertung der Intensitäten, unter Berücksichtigung der Fehlordnung, erforderlich /70/.

Die Ursache der auch nach erneutem Bedampfen beobachtbaren Intensitätsasymmetrie ist in einer Anisotropie des Substrats zu suchen. Die auf Oberflächen wahrscheinlichste Anisotropie stellen parallele Stufen dar, die durch Fehlorientierung beim Schnitt der Fläche entstanden sind. Die Oberfläche des Kupferkristalls war mit einer Genauigkeit von ca. 0.5 Grad nach der kristallographischen (001)-Fläche orientiert. Ihre isotrope makroskopische und die mittels einer Profilmessung bestimmte (Anhang F) mikroskopische Wellung beträgt ebenfalls maximal 0.5 Grad, sodaß ein Vorherrschen anisotroper, weitgehend regelmäßiger Stufen in einer Verteilung isotroper Stufen nicht ausgeschlossen werden kann. Stufen in [110]-Richtung, die dichtesten und stabilsten der fcc-(001)-Fläche, können jedoch die Aufhebung der (010)-Spiegelebene in den Satellitenintensitäten verursachen.



Abb.27, Domänenanordnung des Strukturübergangs (II): Die Satellitenpositionen in Abbildung 25f werden von der dargestellten stark idealisierten Domänenanordnung wiedergegeben. Von Abbildung 26 unterscheidet sich die gezeigte Anordnung lediglich durch die kleineren Domänen und, dadurch bedingt, durch deren veränderte relative Lage.

Die bei Bedeckungen um 0.57 ausgebildeten ovalen Satelliten, in (0.61 0.50) und den äquivalenten Positionen, sind mit einem analogen Modell vereinbar (Abb.27), das auch die Bedeckungsabhängigkeit der Beugungsbilder wiedergibt. Bei wachsender Bedeckung findet ein Schrumpfen der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Domänen statt, während die Dichte der Antiphasengrenzen, an denen zusätzliche Atome Platz finden, zunimmt. Eine höhere Stabilität der dichteren Struktur mag auch die Ursache für einen geringeren, von Stufen der Oberfläche ausgehenden Einfluß sein und erklären, daß bei höheren Bedeckungen keine Intensitätsasymmetrie der Satelliten mehr beobachtbar war.

Ergebnisse

Kupfer(001)-($(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ bis $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$)-Blei

Obwohl die hier dargestellten Modelle den Beugungsbildern und ihrer Folge entsprechen, können sie nur ein qualitatives Bild des Strukturübergangs von der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ - zur $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur wiedergeben. Für detailliertere Informationen über die Anordnung der Domänengrenzen und deren atomare Struktur, insbesondere auch an den Kreuzungspunkten, ist eine Strukturanalyse erforderlich, in der der hohe Fehlordnungsgrad berücksichtigt werden muß, und die im hier notwendigen Umfang mit LEED noch nicht möglich ist.

Teil 4

Diskussion

Die Abfolge der dichten, von Blei auf der Kupfer-(001)-Fläche gebildeten Strukturen ergibt ein konsistentes Bild des Schichtwachstums. Die auf Grund des Metallradienverhältnisses von ca. $\sqrt{2}$ erwartete $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur bildet sich aus und bleibt bis zur dichten Monoschicht wesentliches Strukturelement.

Die reine und ungestörte $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur entspricht der Blei(001)-Fläche, vom periodischen Anteil des Adsorptionspotentials um 3% dilatiert. Die von der metallischen Bindung angestrebte höchste Koordination bedingt die Grubenlage der Bleiatome, und der Schichtabstand ist auf Atomradien zurückzuführen, die denen der reinen Metalle gleichen.

Atomanordnungen und -Radien, die nicht in metallischem Blei enthalten sind, zeigt die dichte Monoschicht mit der $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur. Diese Struktur hat mit einer Blei(111)-Schicht gleicher Dichte keinerlei Ähnlichkeit, die bei freier Beweglichkeit der Adsorbataatome auf dem Substrat gegeben wäre. Hingegen führt die laterale Variation des Adsorptionspotentials zur weitgehenden Lokalisierung aller Bleiatome in den Grubenlagen. Die Adsorbatschicht ist damit von der Substratperiodizität geprägt, die die Anordnung der Bleiatome bestimmt und eine Ausbildung höherer Koordinationen zwischen diesen verhindert.

Sowohl die Blei-Blei-Atomabstände der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur als auch die Blei-Kupfer-Abstände sind geringer als die Radiensummen der reinen Metalle und lassen auf einen um ca. 10% reduzierten Bleiradius schließen. Dieser Radius ist vergleichbar mit dem, der auch in Rhodium- und Palladium-Blei-Legierungen ($RhPb_2$, $PdPb_2$) /71//72/ gefunden wurde. Der Elektronegativitätsdifferenz, die zwischen den Metallen dieser Legierungen nach Pauling /73/ besteht, entsprechen qualitativ die bei der Adsorption von Blei auf Kupfer beobachtbare Austrittsarbeitsverringerng /64/ und der durch diese angezeigte Ladungstransfer an das Substrat.

Mit gleichartigen Modellen sind weitere, von Blei auf fcc-(001)-Flächen gebildete, dichte Überstrukturen interpretierbar. Auf Nickel, dessen Gitterkonstante und Elektronegativität denen von Kupfer fast gleichen, bildet Blei ebenfalls eine $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur aus. Fast identische Blei-Blei-Abstände (bei lateraler Äquidistanz der Atome ca. 8% geringer als im Metall) ergibt ein Lamellen-Modell der $C(3\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur /10//11//12//19/, die mit einer Bedeckung von 0.667 die dichteste des $C(N\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Typs auf Gold(001) ist.

Bei Variation der Bleibedeckung auf Kupfer(001) findet der Strukturübergang zwischen der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ - und der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur durch Einlagerung von Antiphasengrenzen in die $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur statt. Die Bleiatome sind an diesen Antiphasengrenzen dichter angeordnet als in den verbleibenden $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Domänen. Von diesen Verdichtungs-zonen gehen Spannungsfelder aus, die eine gegenseitige Abstossung bewirken, die jedoch bei intermediären Bedeckungen nur eine mäßige Periodizität zur Folge haben. Die große Fehlordnung trägt zu einem hohen Untergrund im Beugungsbild bei und verhindert eine exakte Strukturanalyse. Die Antiphasengrenzen ordnen sich erst knapp unterhalb der Maximalbedeckung und bilden dann die regelmäßigen Lamellen der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur. Atomverschiebungen an den Domänen-grenzen ergeben Abweichungen von einer idealen Antiphasenstruktur, jedoch ist keine Annäherung an inkommensurable Strukturen erkennbar; der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Domänen- und Antipha-

sencharakter des Systems überwiegt eindeutig. Alle Adsorbatstrukturen dieses Systems sind dem weniggleich komplizierten Kondensat eines Gittergases ähnlicher, als einem Modell zweidimensional weitgehend freibeweglicher Adsorbatatome.

Unter der Annahme periodisch variierenden Adsorptionspotentials und harmonischer Wechselwirkungen zwischen den Adsorbatatomen, haben Frank und Van der Merve /74//75/ ein- und zweidimensional die statische Struktur vergleichbarer Systeme in Abhängigkeit der Bedeckung errechnet. Sie zeigten, daß eine von der des Substrats abweichende Adsorbatgitterkonstante zur Ausbildung von Versetzungsgrenzen führt, die Gebiete nur wenig gestörter, einfacher Überstruktur voneinander trennen. Novaco und McTague /76/ und Villain /77/ begründeten in einem detaillierterem Modell eine mögliche Verdrehung dieser Versetzungslinien um nicht-symmetrische Winkel, und Bak et al. /78//79/ sagten die Möglichkeit sich durchkreuzender Versetzungslinien in einem weiteren voraus. Diese Ansätze beschreiben damit teilweise qualitativ das statische Verhalten des hier untersuchten Systems, können jedoch nicht die beobachtete Abfolge der Strukturen in ihrer Gesamtheit und Komplexität wiedergeben.

Teil 5

Zusammenfassung

Von Blei auf der Kupfer(001)-Fläche gebildete Überstrukturen wurden mit qualitativer und quantitativer Auger-Elektronenspektroskopie (AES) und Elektronenbeugung (LEED) untersucht. Hochreines Blei konnte im Ultrahochvakuum auf die präparierte und saubere Kupferfläche bis zu einer Monolage aufgedampft werden. Die Bleibedeckung war dabei mit den an der $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur geeichten Auger-Linienintensitäten des Adsorbats bestimmbar. Eine Diffraktometeranordnung machte eine Erfassung der Reflexintensitätsspektren geordneter Strukturen möglich, und diese konnten zum Vergleich mit Modellrechnungen herangezogen werden. An der Kupfer(001)-Fläche wurde die Anordnung justiert und getestet.

Blei auf Kupfer(001) prägt bei einer Bedeckung von 0.5 eine $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur aus, die einer um ca. 3% dilatierten Blei(001)-Schichtebene gleicht. Ein Vergleich der gemessenen Reflexintensitäten mit Modellrechnungen ergab, daß die Bleiatome dieser Struktur die Lagen mit höchster Blei-Kupfer-Koordination einnehmen, in Atomabständen, die der Summe beider Metallradien gleichen. Der gemittelte Zanazzi-Jona-R-Faktor dieser Strukturanalyse lag bei 0.15.

Zwei grundsätzlich verschiedene Modelle der von der dichten Monoschicht gebildeten $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur wurden diskutiert. Das erste nimmt die Adsorbatatome in der Anordnung einer verzerrten Blei(111)-Schicht an. Rechnungen dieses Modells, für gewellte wie ebene Schichten in ver-

schiedenen Lagen, zeigten bei allen Schichtabständen keinerlei Ähnlichkeit mit den Meßkurven. Ein zweites Modell gleicht einer lamellenartigen Abfolge von $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Domänen, die durch Antiphasengrenzen getrennt sind. Ein Vergleich der experimentellen mit den theoretischen Spektren bestätigte dieses Modell, und ein Satz von Strukturparametern konnte gefunden werden, der ein deutliches R-Faktorminimum von 0.24 ergab. Die Adsorbatschicht resultiert als nur sehr schwach gewellt, mit Atomabständen, die einen um ca. 10% gegenüber dem reinen Metall verringerten Bleiradius anzeigen.

Die Zustände geringer Ordnung bei Bleibedeckungen, zwischen denen der genannten geordneten Strukturen, konnten in ein konsistentes Bild des Strukturübergangs eingefügt werden. Bei steigender Bedeckung bilden sich in der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur Antiphasengrenzen aus, an denen zusätzliche Atome Platz finden. Die zweidimensionale An- und Umordnung dieser Grenzen bedingt mehrere schwach geordnete, bedeckungsabhängige Domänenkonfigurationen, die diffuse und komplexe Reflexbilder erzeugen. In ihrer höchsten zweidimensionalen Verdichtung ordnen sich diese Antiphasengrenzen und bilden die lamellenartigen Domänen der $C(5\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur.

Anhang A

Glossar

Auger-Elektronenspektroskopie (AES):

Die chemische Zusammensetzung von Oberflächen spiegelt sich in den Emissionselektronenspektren wieder, in denen Auger-Elektronen charakteristische Linien erzeugen. Durch den Vergleich mit Referenzspektren können diese Linien, anhand ihrer Energien und Intensitäten, meist eindeutig mit einer Verteilung von Elementen interpretiert werden. Die im untersuchten Energiebereich nur geringen freien Weglängen der Elektronen gestattet die oberflächenspezifische Analyse. Die Auger-Übergänge werden im allgemeinen durch Elektronenbeschuß angeregt.

Bedeckung:

Die kristallographische Bedeckung ist definiert als der Quotient aus der Anzahl der Adsorbatatome und der Anzahl der in der äußersten Substratschicht enthaltenen Atome. Eine dichte Adsorbatschicht muß deshalb nicht der Bedeckung 1.0 entsprechen, wenn der Adsorbatatomradius von dem des Substrats abweicht.

Elektronenbeugung (LEED):

Analog der Röntgenbeugung geben die Reflexpositionen gebeugter Elektronen die Größe der translationsinvarianten Einheitszelle wieder, und die Information über die Atompositionen ist in den Reflexintensitäten enthalten. Bei der Elektronenbeugung zeigen diese Reflexintensitäten jedoch eine äußerst komplexe Energieabhängigkeit, die in keiner kinematischen Näherung beschreibbar ist. Der inelastische und der elastische Streuquerschnitt von Elektronen an Atomen des Kristallgitters ist, anders als der für Röntgenstrahlen, sehr groß, sodaß Vielfachstreuprozesse wesentliche Beiträge liefern. (Die hohen Streuquerschnitte bewirken auch die Oberflächenempfindlichkeit der Methode.) Den wesentlichsten Unterschied zur Röntgenbeugung stellen jedoch die starken Winkel- und Energieabhängigkeiten sowohl der Streuamplituden als auch der Streuphasen dar, die bei den Wechselwirkungen der Elektronen mit den Gitteratomen berücksichtigt werden müssen und aufwendige numerische Programme zur Beschreibung der Beugungsintensitäten erforderlich machen. Im allgemeinen errechnen diese Programme für ein angenommenes Strukturmodell die Intensitäts-Energie-Spektren aller aus dem Kristall austretenden Strahlen. Bei der Diskussion der Modelle hat sich ein Vergleich der errechneten mit den gemessenen Spektren als aussagekräftiges Kriterium erwiesen.

Nomenklatur der Überstrukturen:

In dieser Arbeit wird die Wood'sche Nomenklatur der Überstrukturen /61/ verwandt, die die Überstrukturzelle im Realraum in Einheiten der primitiven Substratzelle beschreibt. In dieser Nomenklatur weist eine $(A*B)R\beta$ -Struktur Translationsvektoren auf, deren Längen dem A- bzw. B-fachen der Substratperiodizität entsprechen, und die gemeinsam um einen Winkel β gegenüber denen des Substrats verdreht (rotated) sind. Ist die Zentrierung dieser Zelle erkennbar, so wird ein C vor die Strukturbezeichnung gesetzt. Diese Nomenklatur weist etliche Mängel auf, hat sich bei vielen

Überstrukturen jedoch als brauchbar erwiesen.

Reflexindizierung:

Die Beugungsreflexe, die auch eine ideale Schichtebene des Substrats ergeben würde, werden ganzzahlig indiziert. Diese Indizierung wird auch bei Überstrukturen beibehalten, sodass Überstrukturreflexe gebrochene Indizes aufweisen.

R-Faktor:

Der R-Faktor (reliability-factor) wird beim Vergleich theoretischer und experimenteller Spektren benutzt, und beschreibt die Diskrepanzen zwischen diesen. Mit zunehmender Übereinstimmung der Kurven nimmt er kleinere Werte an. In dieser Arbeit wird ein von Zanazzi und Jona /60/ definierter R-Faktor benutzt, der im wesentlichen die Ableitungen der Kurven vergleicht. Ergibt sich dieser R-Faktor zu Werten über 0.5 wird das gerechnete Strukturmodell als falsch, bei Werten um 0.35 als wahrscheinlich und bei Werten unter 0.2 als zutreffend angesehen.

Skalierungsfaktor:

Nachteil der üblichen R-Faktoren ist, daß sie die absoluten Reflexintensitäten beim Vergleich der Spektren unberücksichtigt lassen; ein Strukturmodell ist jedoch nur dann konsistent, wenn es auch die absoluten Intensitäten richtig wiedergibt. Der hier verwendete Skalierungsfaktor ist der Quotient aus, im gemeinsamen Energiebereich integrierter, experimenteller und theoretischer Reflexintensität, und er sollte sich für alle Strahlen zu gleichen Werten nahe 1.0 ergeben.

Anhang B

Einzelheiten der Intensitätsrechnungen

Die Intensitätsrechnungen wurden von W. Moritz mit einem von ihm entwickelten Programm /59//63//68//80/ durchgeführt. Die in diese Rechnungen eingegangenen Parameter sind im weiteren kurz skizziert.

Das Programm nützte die 'layer doubling method' /6//81/ für die Berechnung der Streuung zwischen den Schichten ('inter-layer') und die 'matrix inversion method' /4//55//82/ zur Beschreibung der Wellenausbreitung innerhalb einer Schicht ('intra-layer') aus. Maximal acht Streuphasen wurden benutzt, für Blei und Kupfer nach gleichem Verfahren /83/, mittels Überlappung der Ladungsdichten freier Atome und Slater-Austauschterm /84/, errechnet. Der Realteil des inneren Potentials war energieunabhängig für Adsorbat und Substrat als gleich angesetzt und ergab sich aus den R-Faktoranalysen zu Werten um -8eV . Dessen imaginärer Anteil, der die Dämpfung bewirkt, war energieabhängig zu $0.85 \cdot E^{1/3}$ angenommen.

Als Debye-Temperatur von Kupfer wurde der bulk-Wert von 330K /85/ verwendet, und die von adsorbiertem Blei wurde zu ca. 50K (Anhang C) ermittelt. Maximal 24 symmetrisch inäquivalente Strahlen wurden in den Rechnungen vierzähliger Modelle der $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur ausgenützt, sowie 40 Strahlen für die Rechnungen der (0 0)-Strahlen, bei schrägem Einfall, und für das zweizählige Modell dieser Struktur, mit den Bleiatomen in der Brückenlage. Bei letzterem wurden die Intensitäten beider Domänenorientierungen inkohärent gemischt. Bei der $C(5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur nutzte das Programm die primitive Zelle und nur eine der beiden Spiegelebenen

Anhang

Einzelheiten der Intensitätsrechnungen

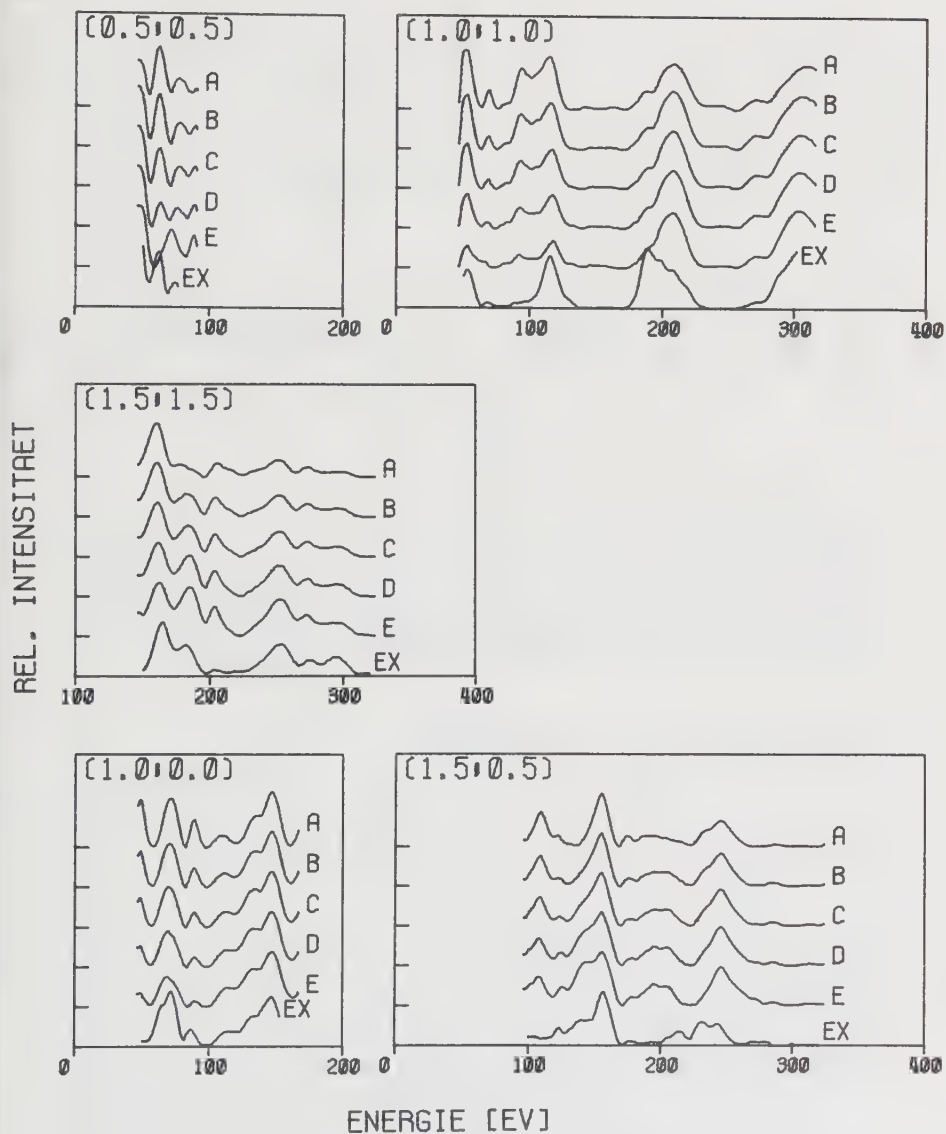
aus. Der zugängliche Energiebereich war bei dieser Struktur auf 160eV begrenzt, bedingt durch die Maximalzahl von 80 Strahlen, die die Rechnerkapazität noch zuließ.

Um die gerechneten und gemessenen Spektren in eine quantitative Relation zu bringen, wurde der von Zanazzi und Jona vorgeschlagene R-Faktor /60/ verwendet. Dieser vergleicht die ersten und zweiten Ableitungen der Kurven und nimmt beim Fehlen jeglicher Übereinstimmung Werte über 0.50 an, läßt bei Werten unter 0.35 das angewandte Strukturmodell als wahrscheinlich erscheinen und ergibt sich bei vollständiger Identität der verglichenen Kurven zu Null. Ein qualitativer visueller Vergleich der Kurven erwies sich, insbesondere bei R-Faktoren über 0.3, als mindestens ebenso nützlich.

Anhang C

die Adsorbat-Debye-Temperatur

Bei den Rechnungen der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur wurde die Debye-Temperatur des adsorbierten Bleis im Bereich von 100K bis 40K variiert (Abb.28). Verglichen mit den durch andere Effekte bedingten Diskrepanzen, ist der Einfluß auf die Spektren nur gering, sodaß eine zuverlässige Bestimmung des optimalen Wertes nicht möglich war. Das Minimum des R-Faktors bei einer Blei-Debye-Temperatur von 50K ist nur schwach und durch einen visuellen Vergleich der Kurven nicht erkennbar; 10K Abweichung erhöhen den gemittelten R-Faktor lediglich von 0.16 auf 0.165.



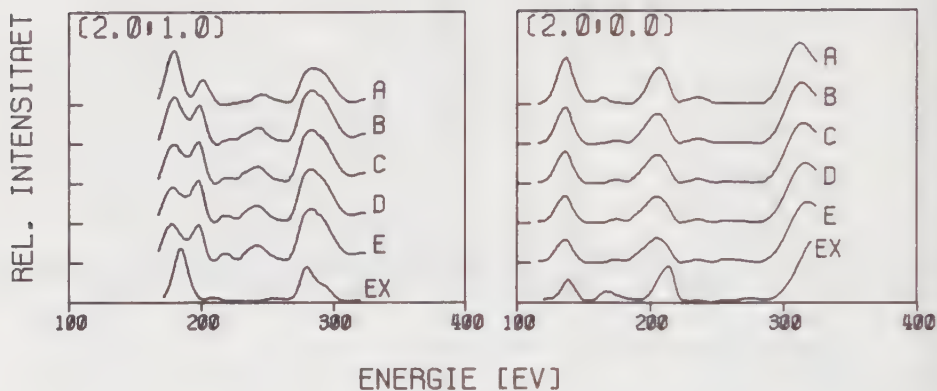


Abb.28, Spektren der $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur bei Debye-Temperaturvariation:

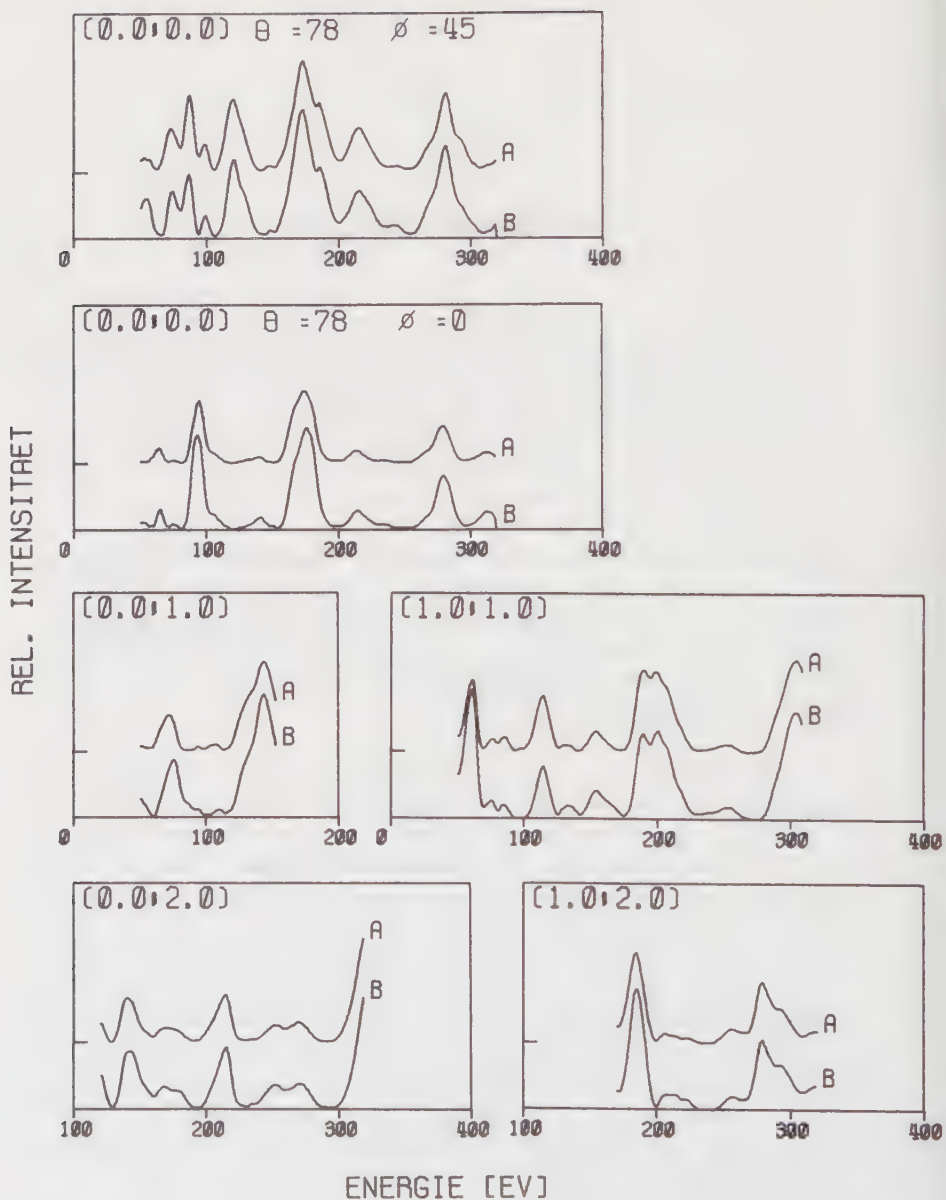
Für Adsorbatatome in Grubenlage bei $2.40\text{\AA}$ Schichtabstand und Debye-Temperaturen von 100K (A), 70K (B), 60K (C), 50K (D) und 40K (E) gerechnete Kurven im Vergleich mit dem Experiment (EX). Die gemittelten R-Faktoren der Kurvensätze ergeben sich zu 0.20, 0.17, 0.165, 0.16 bzw. 0.165.

Anhang D

verunreinigtes Kupfer(001)

Um den Einfluß statistisch verteilter Störstellen auf die Intensitätsspektren bestimmen zu können, wurde die saubere Kupferfläche mit Bleiatomen, einer Bedeckung von 8.5% entsprechend, bedampft. Trotz der relativ hohen Dichte der Adsorbatatome (der mittlere Blei-Blei-Abstand beträgt 3.7 Substratgitterkonstanten), waren weder zusätzliche Reflexe noch eine Modulation des Untergrunds im Beugungsbild ersichtlich, erklärbar mit einer statistischen Verteilung der Bleiatome auf dem Substrat. Eine Erhöhung des Untergrunds, die eine solche Streuzentrenverteilung bewirkt, konnte nicht festgestellt werden; der hohe inelastische Anteil und die unzureichende Genauigkeit der Messung verhinderten den Nachweis.

Die Spektren der verunreinigten Fläche zeigten, im Vergleich mit denen der sauberen (Abb.29), keine neuen Charakteristika, von einer Abnahme der Intensitäten abgesehen. Integral über den Energiebereich nimmt die in den Reflexen enthaltene Intensität durch die Störstellen um 20% ab; ein Einfluß auf die Form der Spektren ist jedoch nur schwach, wie W.Moritz /86/ mit Modellrechnungen ähnlicher Systeme gezeigt hat. Beim Vergleich der Spektren der sauberen mit denen der bleibedeckten Fläche ergibt sich ein gemittelter R-Faktor von 0.03. Der Effekt ist gering, verglichen mit den üblicherweise bei Oberflächenstrukturanalysen erreichbaren R-Faktoren, und läßt deswegen keine Folgerungen über die Lage der Adsorbatatome zu. Statistisch verteilte Einzelstörstellen tragen andererseits bei der Strukturanalyse vermeintlich sauberer Flächen nur wenig zu den verbleibenden Diskrepanzen der Spektren bei.



Anhang

verunreinigtes Kupfer(001)

Abb.29, Spektren von sauberem und 8% bleibedecktem Kupfer(001):

Die Spektren von bleibedecktem Kupfer (A) unterscheiden sich von denen sauberen Kupfers (B) qualitativ nur wenig. Die gemittelten Reflexintensitäten verringern sich durch die ungeordnete Adsorbatschicht um ca. 20%, und der Vergleich beider Kurvensätze ergibt einen mittleren R-Faktor von 0.03.

Anhang E

Kupfer(001)-(2√2*2√2)R45°-Blei

Bei Bedeckungen um 0.22 entstehen erste vom Untergrund unterscheidbare Reflexe der $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur, sind ab Bedeckungen von ca. 0.29 kontrastreich und scharf und bleiben bis zur vollständigen Ausbildung der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur im Beugungsbild erkennbar.

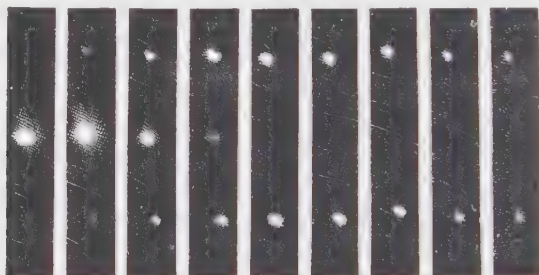


Abb.30, $(0.5\ 0.5)$ -Strahl der $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ - und der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur:

Die Folge zeigt die Intensitäten des $(0.5\ 0.5)$ -Strahls sowie die der $(0.25\ 0.75)$ - und $(0.75\ 0.25)$ -Strahlen beim Übergang von der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ - zur $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur. Der $(0.5\ 0.5)$ -Strahl der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur ist unter vorliegenden Beugungsbedingungen intensiv, der der $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur jedoch ohne Intensität. Die Bedeckung bei Verschwinden des halbzahligen Strahls beträgt ca. 0.37. (Die Elektronenenergie betrug hier 25eV, und der Primärstrahl traf unter einem Winkel von 80 Grad auf den Kristall auf, mit dem $(0.5\ 0.5)$ -Strahl in der Beugungsebene.)

Eine Abgrenzung zwischen der (2√2*2√2)R45°- und der (√2*√2)R45°-Struktur ist im allgemeinen nicht möglich; da die halbzahligen Reflexe von beiden erzeugt werden, sind Anteile der zweiten Struktur im Beugungsbild der ersten nicht erkennbar. Dynamische Beugungseffekte ließen jedoch eine Abgrenzung zu; bei 25eV Elektronenenergie und bei um 10 Grad zum einfallenden Elektronenstrahl verkipptem Kristall war der (0.5 0.5)-Strahl der (√2*√2)R45°-Struktur sehr intensiv, während der der (2√2*2√2)R45°-Struktur visuell nicht mehr erkennbar war (Abb.30). In dieser Justierung konnte nachgewiesen werden, daß bei Bedeckungen um 0.37 sich erste Inseln der (√2*√2)R45°-Struktur zu bilden beginnen, und die (2√2*2√2)R45°-Struktur die höchsten Reflexintensitäten zeigt.

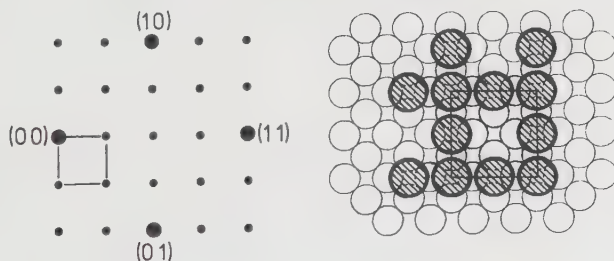


Abb.31, Beugungsbild und Modell der (2√2*2√2)R45°-Struktur: Das einzige mit einer Grubenlage des Adsorbats und mit der gemessenen Bedeckung zu vereinbarende Modell.

Die Zellgröße der (2√2*2√2)R45°-Struktur läßt nur Vielfache von 0.125 als Bedeckung zu, sodaß der beobachtete Wert von 0.37 einer Besetzung der primitiven Zelle mit drei Atomen entspricht. (Keine anderen Strukturen, auch nicht mehrere niedersymmetrische, können alle Reflexlagen der

(2√2*2√2)R45°-Struktur wiedergeben.) Die Besetzung der primitiven Zelle mit drei Atomen in den auch von der (√2*√2)R45°-Struktur bevorzugten Grubenlagen ergibt ein Strukturmodell, das sich von den bisher vorgeschlagenen /13//16/ wesentlich unterscheidet (Abb.31). Der Übergang zur (√2*√2)R45°-Struktur findet in diesem Modell durch Auffüllen der noch freien Adsorbatplätze statt, und erklärt den kontinuierlichen Wechsel der Beugungsbilder, ohne daß neue Zwischenstrukturen erkennbar werden. Bei ausreichender Temperung zeigen die Reflexe nach Änderung der Bedeckung keine visuell beobachtbare Verbreiterung, sodaß dieser Übergang, wie auch die Bildung der (2√2*2√2)R45°-Struktur bei Bedeckungen um 0.3, durch das Wachstum großer Inseln abläuft.

Der für Rechnungen dieses Strukturmodells erforderliche Strahlensatz war zu groß, um eine Bestätigung zuzulassen.

Anhang F

Stufenverteilung auf Kupfer(001)

Stufenverteilungen auf der Oberfläche führen bei der Energievariation zu oszillierenden Reflexbreiten /87/, wobei die Breitenminima durch die Auflösung der apparativen Anordnung /88/, und die Maxima durch deren Faltung mit der stufenbedingten Reflexverbreiterung bestimmt sind. Um die kristallographische Ordnung der präparierten Kupferoberfläche zu kontrollieren, wurden die Profile des (0 0)-Strahls in (1 1)-Richtung bei Energien zwischen 50eV und 300eV aufgenommen. Eine Entfaltung mit der anhand der Halbwertsbreitenminima ermittelten Instrumentenfunktion ergab die energieabhängige und ausschließlich durch atomare Stufen bedingte Strahlverbreiterung von 0.008 reziproken Einheiten (Abb.32). Mit dieser war direkt eine Nachfolgewahrscheinlichkeit der Stufen /89//90//91//92//93/, und deren mittlere Verteilung berechenbar /24//94//95/. Die mittlere Terrassenbreite ergab sich zu 80 Gitterkonstanten.

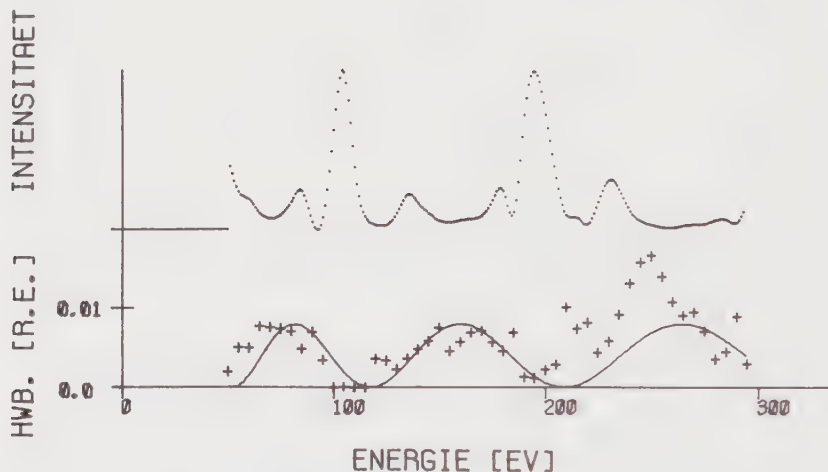


Abb.32, Halbwertsbreiten des Cu(001)-(0 0)-Strahls:

Die Intensität und die mit der Instrumentenfunktion entfaltete Halbwertsbreite des (0 0)-Strahls sind hier gegen die Energie aufgetragen. (Die gemessenen, nicht entfalteten Breiten waren ca. 5 bis 10 mal größer.) Der Einfallswinkel des Primärstrahls betrug 70 Grad, und die Profile wurden in (1 1)-Richtung bestimmt. Die Maximalverbreiterung von ca. 0.008 reziproken Einheiten entspricht einer mittleren Stufenwahrscheinlichkeit von etwa 0.012 (z.B. /94/). Die ausgezogene Kurve gibt die für eine solche Stufenverteilung und bei idealer Stufenhöhe errechnete Energieabhängigkeit der Reflexbreiten wieder. (Die großen Abweichungen über 200eV waren durch die Instrumentenfunktion bedingt, die bei zunehmender Energie im reziproken Raum breiter wird und eine Entfaltung erschwert.)

Anhang G

Antiphasendomänen mit überlagerter Formfaktormodulation

Regelmäßig angeordnete Antiphasendomänen führen in einfacher kinematischer Rechnung zur Aufspaltung der ungeradzahlig indizierten Reflexe in symmetrische Satelliten (z.B. /96//97//98//99//100/), mit wachsendem Abstand vom ursprünglichen Reflexort rasch abfallender Intensität. Ihr wesentliches Kennzeichen ist, daß die Reflexe mit geradzahlig Indizes (bei der $(\sqrt{2} \cdot \sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur die Hauptreflexe) weder aufspalten, noch Satelliten zeigen. Eine Vielfachstreuung führt jedoch, selbst bei idealer Antiphasenlage aller Streuzentren, zu Abweichungen von diesem Reflexbild. Die Vielfachstreuung macht den Streuprozess auch von der Umgebung der Streuzentren abhängig /89//90//91//92//101/, sodaß Atome der Domänengrenzen andere Formfaktoren als jene in deren Mitten ergeben. Im nachfolgenden wird in einem kinematischen Modell der Einfluß einer der Domänenabfolge überlagerten Formfaktormodulation auf die Satellitenintensitäten untersucht.

Die Gitterkonstante wird als Einheit und die Länge der aus M Streuzentren bestehenden Domäne mit $M+0.5$ angenommen. Der Formfaktor des Atoms m nimmt in einer Fourier-Reihe den Wert

$$(1) \quad f(m) = f_0 \left(1 - \sum_j f_j \cos \left(2\pi j \frac{m}{M+1/2} \right) \right)$$

an; die Modulation hat die Periodizität der Domänenabfolge und kann reelle wie komplexe Werte annehmen. Der normierte Strukturfaktor einer Domäne errechnet sich daraus (analog /102/) zu

$$(2) \quad F(h') = f_0 \frac{e^{\pi i \frac{h'}{2M+1}}}{M} \left(\frac{1 - e^{\frac{-2\pi i h' M}{M+1/2}}}{1 - e^{\frac{-2\pi i h'}{M+1/2}}} - \sum_j \frac{4f_j}{2} \left(\frac{1 - e^{\frac{-2\pi i (h'+j) M}{M+1/2}}}{1 - e^{\frac{-2\pi i (h'+j)}{M+1/2}}} + \frac{1 - e^{\frac{-2\pi i (h'-j) M}{M+1/2}}}{1 - e^{\frac{-2\pi i (h'-j)}{M+1/2}}} \right) \right)$$

wobei

$$(3) \quad h' = h(M+1/2)$$

gesetzt wurde, sodaß die Satelliten mit h' ganzzahlig indiziert sind, und Satelliten der Ordnungen M bzw. $M+1$ dem aufgespaltenen Reflex entsprechen. (Hier werden nur die tatsächlich erscheinenden Satelliten und nicht die ausgelöschten gezählt. Die ursprüngliche Lage des aufgespaltenen Reflexes entspricht deshalb keinem ganzzahligen Satellitenindex.)

Für große M sind die, auf die geradzahlgigen Reflexe normierten Intensitäten leicht abschätzbar; Satelliten um diese ergeben Intensitäten

$$(4a) \quad I(h') = \frac{|4f_n|^2}{4} \quad \text{für } h' = \pm n, n=1, 2, \dots \ll M$$

nur vom Betrag der Modulationsamplitude abhängig, und zeigen damit das von Dichtewellen /102/ bekannte Verhalten.

Auf Grund der Koinzidenz von Modulation und Domänenabfolge sind die Satellitenintensitäten um die ungeradzahlgigen Reflexlagen stark vom (komplexen) Argument der Modulationsamplitude abhängig und ergeben sich zu

$$(4b) \quad I(h') = \frac{4}{\pi^2} \left| \frac{1}{2n-1} + \sum_j \frac{(-1)^j}{2n-1 - \frac{4j^2}{2n-1}} 4f_j \right|^2$$

für $h' = M+n, h' = M+1-n, n=1, 2, \dots \ll M$

Wegen komplexer Koinzidenzen sind Intensitäten kleiner Domänen analytisch nicht gleich einfach abschätzbar, zeigen aber ein analoges Verhalten, das in Abbildung 33 dargestellt ist.

Die Überlagerung eines Antiphasensystems mit einer Modulation der Formfaktoren hat die Ausbildung weiterer Satelliten zur Folge. Um die geradzahlig indizierten Reflexe entstehen Satelliten, deren Intensitäten im wesentlichen vom Modulationsbetrag abhängig sind. Die Aufspaltungssatelliten um die ungeradzahlig Reflexlagen behalten im Mittel ihre hohe Intensität bei, und um diese können sich weitere Satelliten ausprägen. Die Intensitäten letzterer sind zusätzlich stark vom Argument der Modulation abhängig und im allgemeinen geringer als die jener Satelliten, die die geradzahlig Reflexe umgeben.

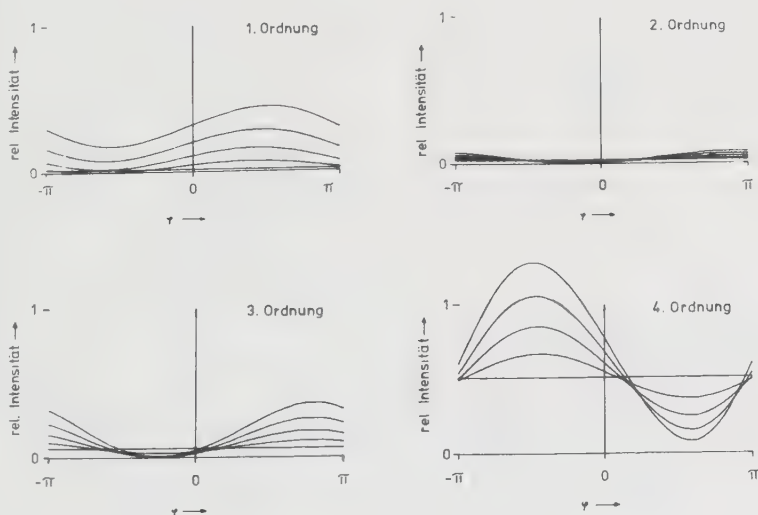


Abb.33, Satellitenintensitäten von Antiphasendomänen mit überlagelter Formfaktormodulation:

Die auf die geradzahlig Reflexe normierten integralen Satellitenintensitäten sind gegen das Argument ψ der sinusförmigen Formfaktormodulation $|df|e^{i\psi}$ für Absolutbeträge $|df|$ von 0., 0.25, 0.50, 0.75 und 1. aufgetragen. (Die horizontale Gerade entspricht dem Modulationsbetrag von 0., und die mit der stärksten Oszillation dem von 1.) Eine Domäne wurde 4.5 Gitterkonstante breit und mit 4 Atomen besetzt gewählt, sodaß die vierte Satellitenordnung den Aufspaltungssatelliten des ungeradzahlig Reflexes entspricht.

Anhang H

Reflexprofil eines statistischen Mehrdomänensystems

Im nachfolgenden wird ein Ausdruck für die Intensitätsverteilung eines eindimensional fehlgeordneten Mehrdomänensystems angegeben. Die Darstellung zeichnet sich dadurch aus, daß sie die Intensität als Abhängige nur der Fourier-Transformierten der Domänenbreitenverteilungen angibt und nicht an spezielle Statistiken gebunden ist. Die Intensität wird hier für ein Zweidomänensystem hergeleitet; die Zahl der Domänenarten unterliegt aber, wie die mögliche Anzahl der Domänenbreiten, keiner Beschränkung. (Ein analytischer Ausdruck für Intensitätsverteilungen äquivalenter Systeme wurde auch von W. Adlhart angegeben /103/. Die von diesem Autor angegebene Herleitung unterscheidet sich wesentlich von der nachfolgenden, kommt jedoch zu gleichen numerischen Ergebnissen /104/.)

Die Intensität des statistischen eindimensionalen Domänensystems läßt sich nach /93//105//106//107/ als

$$(5) \quad I(\vec{k}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{n=1}^{N-1} \sum_{ik} F_i^* \left\{ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{in}} \right\}_{ik}^n P_k F_k^{(N-n)} + cc + \sum_i F_i^* P_i F_i \right)$$

schreiben. In (5) gibt der Ausdruck in der geschwungenen Klammer die Matrixpotenz an. (Hier wurde die Matrixdarstellung der Nachfolgewahrscheinlichkeit gewählt; die mit Differenzengleichungen ist, wie bei allen diskreten Markov-Ketten, ebenfalls möglich.)

Es bedeuten:

$\vec{k}$ den Streuvektor,
 $\vec{r}_i$ die Länge der Domäne 1,

Anhang

Reflexprofil eines statistischen Mehrdomänensystems

- P_l die a-priori-Wahrscheinlichkeit der Domäne l,
 P_{lm} die 'a-posteriori'- oder Nachfolgewahrscheinlichkeit der Domäne l auf die Domäne m und
 $\bar{f}_l$ den Strukturfaktor der Domäne l.

Im allgemeinen muß zur Summation über n die komplexe Matrix $\{ e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{L}_l} P_{lm} \}$ für jeden Streuvektor $\vec{k}$ neu diagonalisiert werden; hier wird jedoch ein System betrachtet, in dem sich (5) analytisch vereinfachen läßt.

Es werden zwei Domänenarten A und B angenommen (dies ist aber auf eine beliebige Anzahl erweiterbar), die sich alternierend folgen. (Die Folge z.B. A-A kann aber mit dem Ansatz einer endlichen Wahrscheinlichkeit für Domänen B der Länge 0 ebenfalls berücksichtigt werden.) Die Längenverteilung der Domänen soll nur der 'a-priori'-Wahrscheinlichkeit gehorchen, sodaß gilt

$$\begin{aligned} P_{lm} &= P_A \quad \text{für } l \in A \text{ und } m \in B, \\ (6) \quad P_{lm} &= P_B \quad \text{für } l \in B \text{ und } m \in A \text{ und} \\ P_{lm} &= 0 \quad \text{sonst,} \end{aligned}$$

und die mit den Phasentermen $e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{L}_l}$ multiplizierte Markov-Matrix (P_{lm}) die einfachere Form annimmt

$$(7) \quad \begin{pmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} A_{lm} &= P_A e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{L}_A} \\ B_{lm} &= P_B e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{L}_B} \end{aligned}$$

Diese Matrix besitzt nur zwei von Null verschiedene Eigenwerte

$$\begin{aligned} \lambda_A &= \sum_j P_{jA} e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{L}_{jA}} \\ (8) \quad \lambda_B &= \sum_j P_{jB} e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{L}_{jB}} \end{aligned}$$

die identisch mit den Fourier-Transformierten der Längenverteilungen beider Domänenarten sind.

Für diese Matrix gilt

$$(9) \quad \begin{pmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{pmatrix}^{2n} + \begin{pmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{pmatrix}^{2n+1} = (\lambda_A \lambda_B)^n \begin{pmatrix} \lambda_B A & A \\ B & \lambda_A B \end{pmatrix}$$

und die Summation über n wird in (5) damit analytisch ausführbar.

Nimmt man weiter nur kinematische Strukturfaktoren der Domänen

$$(10) \quad \bar{f}_A = \sum_{m=0}^{M_A-1} f_A e^{-2\pi i m \vec{a} \cdot \vec{k}}$$

an, mit

$$M_A \vec{a} = \vec{L}_A$$

und M_A der Zahl der Elementareinheiten mit Gitterkonstante $\vec{a}$ in der Domäne 1 der Art A, so folgt nach einfachen Zwischenrechnungen unmittelbar für den diffusen Anteil der Intensität

$$(11) \quad I_D(\vec{k}) = \frac{f_A^* f_A}{2 \sin^2 \pi \vec{k} \cdot \vec{a}} \operatorname{Re} \left((1-\lambda_A) - \frac{(1-\lambda_A)^2 \lambda_B}{1-\lambda_A \lambda_B} \right) + \frac{f_B^* f_B}{2 \sin^2 \pi \vec{k} \cdot \vec{b}} \operatorname{Re} \left((1-\lambda_B) - \frac{(1-\lambda_B)^2 \lambda_A}{1-\lambda_A \lambda_B} \right) - \operatorname{Re} \left(\frac{e^{-\pi i \vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} f_A^* f_B + e^{-\pi i \vec{k}(\vec{b}-\vec{a})} f_B^* f_A}{2 \sin \pi \vec{k} \cdot \vec{a} \sin \pi \vec{k} \cdot \vec{b}} \frac{(1-\lambda_A)(1-\lambda_B)}{1-\lambda_A \lambda_B} \right)$$

sowie für Streuvektoren für die

$$1-\lambda_A \lambda_B = 0$$

gilt, ergeben sich Bragg-Reflexe der Integralintensität

$$(12) \quad I_S(\vec{k}) = \frac{f_A^* f_A}{2 \sin^2 \pi \vec{k} \cdot \vec{a}} \operatorname{Re} \left((1-\lambda_A)^2 \lambda_B \right) + \frac{f_B^* f_B}{2 \sin^2 \pi \vec{k} \cdot \vec{b}} \operatorname{Re} \left((1-\lambda_B)^2 \lambda_A \right) + \operatorname{Re} \left(\frac{e^{-\pi i \vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} f_A^* f_B + e^{-\pi i \vec{k}(\vec{b}-\vec{a})} f_B^* f_A}{4 \sin \pi \vec{k} \cdot \vec{a} \sin \pi \vec{k} \cdot \vec{b}} (1+\lambda_A \lambda_B) \right)$$

Für Antiphasensysteme kann

$$\lambda_B = e^{-\pi i \vec{k} \cdot \vec{a}}, \quad f_B = 0$$

gesetzt werden, womit sich der Ausdruck für den diffusen Anteil der Intensität zu

$$(14) \quad I_D(\vec{k}) = \frac{f_A^* f_A}{2 \sin^2 \pi \vec{k} \cdot \vec{a}} \operatorname{Re} \left((1 - \lambda_A) - \frac{(1 - \lambda_A)^2 \lambda_B}{1 - \lambda_A \lambda_B} \right)$$

reduziert.

In Abbildung 34 ist (14) für Gauß-Verteilungen von Antiphasendomänenbreiten dargestellt.

Während die Aufspaltungssatelliten um die ungeradzahli-gen Reflexe recht scharf bleiben, schmieren durch eine vermehrte Fehlordnung die Satelliten um die geradzahli-gen Reflexe stark aus; alle weiteren Satelliten können auch ganz in einen ortsabhängigen Untergrund aufgehen.

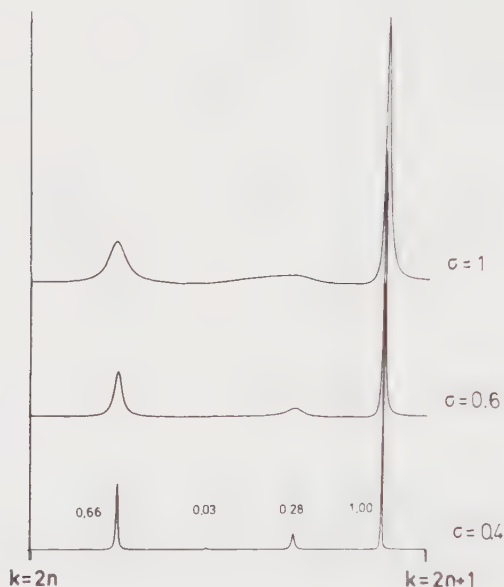


Abb. 34, Intensitätsprofile von Antiphasendomänen statistischer Breite:

Das in kinematischer Näherung gerechnete Satellitenintensitätsprofil zwischen einem geradzahligen und einem ungeradzahligen Reflexort ist hier dargestellt. Gauß-förmige Verteilungen der Domänenbreiten m

$$\propto e^{-\frac{(M-m)^2}{2\sigma^2}}$$

mit Streuungen σ von 0.4, 0.6, und 1 um den Mittelwert $M=4$, waren angenommen worden. Um den ersten Satelliten sichtbar zu machen, waren die Domänen mit zwei Atomen weniger besetzt, als ihrer Breite entsprach (Anhang G). Neben der untersten Kurve sind die Integralintensitäten der Reflexe angegeben. (Wie auch die Profile, sind diese auf den intensivsten Satelliten normiert.) Eine lageabhängige Verbreiterung ist ersichtlich, die dazu führt, daß bei größerer Fehlordnung nur den ganzzahlig indizierten Positionen benachbarte Satelliten erkennbar bleiben.

Anhang I

Bibliographie

- /1/ British Museum, Cuneiform Texts from Babylonian Tablets in the B. M., Vol.5, London (1898) plate IV
- /2/ D.Tabor, Surface Sci. 89 (1979) 1
- /3/ C.Davisson und L.H.Germer, Phys. Rev. 30 (1927) 705
- /4/ J.P.Pendry, J. Phys. C 4 (1971) 2514
- /5/ D.W.Jepsen et al., Phys. Rev. Lett. 26 (1971) 1365
- /6/ M.A.Van Hove und S.Y.Tong, Series in Chemical Physics 2, Springer Verlag, Berlin (1979)
- /7/ F.Delamare und G.E.Rhead, Surface Sci. 35 (1973) 172
- /8/ J.Perdereau und I.Szymerska, Surface Sci. 32 (1972) 247
- /9/ C.Argile und G.E.Rhead, Surface Sci. 78 (1978) 115
- /10/ J.P.Biberian und G.E.Rhead, J. Phys. F 3 (1973) 675
- /11/ A.K.Green et al., Thin Solid Films, 52 (1978) 163
- /12/ J.P.Biberian, Surface Sci. 74 (1978) 437
- /13/ J.Henrion und G.E.Rhead, Surface Sci. 29 (1972) 20
- /14/ M.-G.Barthes und G.E.Rhead, Surface Sci. 80 (1979) 421
- /15/ J.M.Moison und J.L.Domange, Surface Sci. 97 (1980) 1
- /16/ A.Sepulveda und G.E.Rhead, Surface Sci. 66 (1977) 436
- /17/ D.Chadwick und A.B.Christie, Proc. 4th ICSS, Cannes (1980) 423
- /18/ D.Chadwick und A.B.Christie, Surface Sci. 82 (1979) L293
- /19/ J.P.Biberian und M.Huber, Surface Sci. 55 (1976) 259
- /20/ C.Hellmann, Diplomarbeit, Universität München (1981)
- /21/ Materials Research Corporation, New York, Materialzertifikat
- /22/ W.J.McG.Tegart, The Electrolytic and Chemical Polishing of Metals, Pergamon Press, London (1959)

- /23/ W.Espe, Werkstoffkunde der Hochvakuumtechnik, VEB Verl. d. dt. Wiss., Berlin (1959)
- /24/ D.Wolf, Dissertation, Universität München (1972)
- /25/ M.v.Ardenne, Tabellen zur angewandten Physik, VEB Verl. d. dt. Wiss., Berlin (1964)
- /26/ M.Welz, Dissertation, Universität München (1980)
- /27/ N.J.Taylor, Rev. Sci. Instr. 40 (1969) 792
- /28/ P.W.Palmberg, Appl. Phys. Lett. 13 (1968) 183
- /29/ P.W.Palmberg und T. N. Rhodin, J. Appl. Phys. 39 (1968) 2425
- /30/ C.C.Chang, Surface Sci. 25 (1971) 53
- /31/ K.Müller, Springer Tracts of Modern Physics, 77 (1975) 97
- /32/ P.W.Palmberg et al., Handbook of Auger Electron Spectroscopy, Ph. Electr. Ind. Inc., Edina (1972)
- /33/ G.Ertl und J.Küppers, Low Energy Electrons and Surface Chemistry, Verlag Chemie, Weinheim (1974)
- /34/ L.McDonnel et al., Surface Sci. 40 (1973) 669
- /35/ L.McDonnel et al., Surface Sci. 51 (1975) 249
- /36/ G.E.Becker und H.D.Hagstrum, J. Vac. Sci. Techn. 11 (1974) 284
- /37/ J.Kirschner, Topics in Current Physics 4, Springer Verlag, Berlin (1977) 59
- /38/ C.Argile und G.E.Rhead, Surface Sci. 53 (1975) 659
- /39/ O.Oda und G.E.Rhead, Surface Sci. 92 (1980) 467
- /40/ G.E.McGuire, Auger Electron Spectroscopy Reference Manual, Plenum Press, New York (1979)
- /41/ P.B.Needham et al., Appl. Phys. Lett. 21 (1972) 502
- /42/ M.P.Seah, Surface Sci. 32 (1972) 703
- /43/ M.Perdereau, Surface Sci. 24 (1971) 239
- /44/ H.E.Bishop und J.C.Riviere, J. Appl. Phys. 40 (1969) 1740
- /45/ A.F.Armitage et al., Surface Sci. 100 (1980) L483
- /46/ W.Ehrenberg, Phil. Mag. 18 (1934) 878
- /47/ E.J.Scheibner et al., Rev. Sci. Instr. 31 (1960) 784
- /48/ L.H.Germer und C.D.Hartman, Rev. Sci. Instr. 31 (1962) 784
- /49/ L.N.Tharp und E.J.Scheibner, J. Appl. Phys. 38 (1967) 3320
- /50/ J.J.Lander et al., Rev. Sci. Instr. 33 (1962) 782

Anhang

Bibliographie

- /51/ M.B.Webb und M.G.Lagally, Solid State Physics 28 (1973) 301
- /52/ G.Carpentier, Surface Sci. 26 (1971) 429
- /53/ P.M.Marcus et al., Surface Sci. 31 (1972) 180
- /54/ G.E.Laramore, Phys. Rev. B 9 (1974) 1204
- /55/ J.B.Pendry, Low Energy Electron Diffraction, Acad. Press, London (1974)
- /56/ G.G.Kleinman und J.M.Burkstrand, Surface Sci. 50 (1975) 493
- /57/ D.L.Adams und U.Landman, Phys. Rev. B 15 (1977) 3775
- /58/ J.R.Noonan und H.L.Davis, Proc. 4th ICSS, Cannes (1980) 1100
- /59/ W.Moritz, private Mitteilung
- /60/ E.Zanazzi und F.Jona, Surface Sci. 62 (1977) 61
- /61/ E.Wood, J. Appl. Phys. 35 (1963) 1306
- /62/ A.D.Mitchell et al., Interatomic Distances, the Chemical Society, London (1958)
- /63/ W.Hösler und W.Moritz, Surface Sci. in Druck
- /64/ F.Müller und W.Hösler, unveröffentlicht
- /65/ G.E.Rhead, J. Vac. Sci. Techn. 13 (1976) 603
- /66/ M.Huber und J.Oudar, Surface Sci. 47 (1975) 605
- /67/ International Tables for Crystallography, Vol. I
- /68/ W.Hösler und W.Moritz, Verhandlungen der DPG, (1982) 937
- /69/ M.Henzler, Surface Sci. 73 (1978) 240
- /70/ H.Jagodźinski und B.Penzkofer, Acta Cryst. A 37 (1981) 754
- /71/ E.E.Havinga et al., J. Less-Common Metals 27 (1972) 169
- /72/ in J.Trotter, Structure Reports 38A (1972) 5
- /73/ L.Pauling, The Nature of the Chemical Bond, Cornell University Press, Ithaca (1948)
- /74/ F.C.Frank und J.H.Van der Merwe, Proc. Roy. Soc. London A198 (1949) 205
- /75/ J.H.Van der Merwe, J. Appl. Phys. 41 (1970) 4725
- /76/ A.D.Novaco und J.P.McTagu, Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 1286
- /77/ J.Villain, Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 36
- /78/ P.Bak et al., Phys. Rev. B 19 (1979) 1610

- /79/ J.Villain, in S.K.Sinha, Ordering in Two Dimensions, North Holland Inc. New York (1980) 123
- /80/ W.Moritz, Dissertation, Universität München (1976)
- /81/ M.A.Van Hove und J.B.Pendry, J. Phys. C 8 (1975) 1362
- /82/ J.L.Beeby, J. Phys. C 1 (1968) 82
- /83/ das Programm wurde von K.Heinz, Universität Erlangen, zur Verfügung gestellt
- /84/ K.Schwarz, Theoret. Chim. Acta 34 (1974) 225
- /85/ International Tables for X-Ray Crystallography, Vol.III
- /86/ W.Moritz, in Surface Structure by LEED, Plenum Press, New York (1981)
- /87/ M.Henzler, Topics in Current Physics 4, Springer Verlag, Berlin (1977) 117
- /88/ G.C.Wang und M.G.Lagally, Surface Sci. 81 (1979) 69
- /89/ H.Jagodzenski, Proc. 3rd ICSS, Vienna (1977) 2391
- /90/ W.Moritz, Inst. Phys. Conf. Ser. 41 (1978) 261
- /91/ H.Jagodzenski et al., Surface Sci. 77 (1978) 233
- /92/ W.Moritz et al., Surface Sci. 77 (1978) 249
- /93/ H.Jagodzenski, Acta Cryst. 2 (1949) 201
- /94/ D.Wolf et al., Surface Sci. 77 (1978) 265
- /95/ W.Moritz und D.Wolf, Proc. 4th ICSS, Cannes (1980) 1295
- /96/ A.J.C.Wilson, Proc. Roy. Soc. A 181 (1943) 360
- /97/ A.J.C.Wilson, X-Ray Optics, John Wiley, New York (1949)
- /98/ P.Perio und Tournaire, Acta Cryst. 12 (1959) 1032
- /99/ R.L.Park, in G.A.Somorjai, the Structure and Chemistry of Solid Surfaces, John Wiley Inc. New York (1968) 28
- /100/ R.L.Park und J.E.Houston, Surface Sci. 18 (1969) 213
- /101/ H.Jagodzenski, Phys. Stat. Sol. 49 (1978) 119
- /102/ M.Korekawa, Habilitationsschrift, Universität München (1967)
- /103/ W.Adhart, Acta Cryst. A 37 (1981) 794
- /104/ W.Adhart, private Mitteilung
- /105/ A.J.C.Wilson, Proc. Roy. Soc. A 180 (1942) 277
- /106/ S.B.Hendricks und E.Teller, J. Chem. Phys. 10 (1942) 147
- /107/ H.Jagodzenski, Acta Cryst. 7 (1954) 17

Anhang J

Verzeichnis der Abbildungen

- 1: Ansicht des Rezipienten
- 2: Ansicht des Aufdampfofens
- 3: Auger-Spektren von Kupfer
- 4: Auger-Spektren von $\text{Cu}(001)$ - $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Pb (100eV-1000eV)
- 5: Auger-Spektrum von $\text{Cu}(001)$ - $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Pb (50eV-100eV)
- 6: Bleibedeckung und Überstruktur
- 7: Ansicht des Beugungsraumes
- 8: Skizze der Beugungsanordnung
- 9: Ansicht des Faraday-Bechermanipulators
- 10: Beugungsbilder der geordneten Strukturen
- 11: Spektren von $\text{Cu}(001)$
- 12: R-Faktor von $\text{Cu}(001)$
- 13: Beugungsbild und Modelle der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 14: Spektren der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Strukturmodelle
- 15: Spektren der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 16: R-Faktor der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 17: Beugungsbild und Modelle der $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 18: Spektren pseudohexagonaler Modelle der $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 19: R-Faktor der $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur, Lateralparameter
- 20: R-Faktor, Wellung
- 21: R-Faktor, Schichtabstand
- 22: Spektren der $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 23: Symmetrieeerniedrigte Modelle der $\text{C}(5\sqrt{2}*\sqrt{2})\text{R}45^\circ$ -Struktur
- 24: Beugungsbilder des Strukturübergangs
- 25: Strukturübergang, Intensitätsverteilung um (0.5 0.5)
- 26: Domänenanordnung des Strukturübergangs (I)
- 27: Domänenanordnung des Strukturübergangs (II)

Anhang

Verzeichnis der Abbildungen

- 28: Spektren der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur bei Debye-Temperaturvariation
- 29: Spektren von sauberem und 8% bleibedecktem Kupfer(001)
- 30: (0.5 0.5)-Strahl der $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ - und der $(\sqrt{2}*\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur
- 31: Beugungsbild und Modell der $(2\sqrt{2}*2\sqrt{2})R45^\circ$ -Struktur
- 32: Halbwertsbreiten des Cu(001)-(0 0)-Strahls
- 33: Satellitenintensitäten von Antiphasendomänen mit überlagerter Formfaktormodulation
- 34: Intensitätsprofile von Antiphasendomänen statistischer Breite

Anhang K

Sachregister

Abbildungsverzeichnis	97
Antiphasendomänen	85
Aufdampfofen	9
Auger-Analyse, qualitativ	11
Auger-Analyse, quantitativ	15
Auger-Elektronenspektroskopie (AES)	10
Auger-Elektronenspektroskopie (AES)	69
Bedeckung	69
Beugungsgeometrie	21
Beugungsgeometrie	21
Bibliographie	93
Blei	9
Blei	16
Cu(001)	29
Cu(001), Stufenverteilung	83
Cu(001), verunreinigt	77
Cu(001)-($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Pb	33
Cu(001)-(($\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45° bis C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°)-P54	
Cu(001)-($2\sqrt{2} \cdot 2\sqrt{2}$)R45°-Pb	80
Cu(001)-C($5\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}$)R45°-Pb	41
Debye-Temperatur	74
Diffraktometer	18
Diskussion	64
Einleitung	1
Elektronenbeugung (LEED)	18
Elektronenbeugung (LEED)	70
Elektronenkanone	10
Elektronenkanone	18
Ergebnisse	26
Experiment	4

Anhang
Sachregister

Faraday-Becher	21
Formfaktormodulation	85
Glossar	69
Intensitätsmessung	23
Intensitätsrechnungen	72
Ionenbeschuß	8
Kohlenstoff	14
Kristall	4
Kupfer	4
Lamellen-Modell	47
Mehrdomänensystem	88
Profilmessung	25
Präparation	5
Präparation	6
Präparation	11
pseudohexagonales Modell	43
R-Faktor	29
R-Faktor	71
R-Faktor	72
Reflexindizierung	71
Reflexprofilberechnung	88
Restgasdruck	6
Sachregister	89
Schwefel	14
Skalierungsfaktor	32
Skalierungsfaktor	71
Temperung	8
Vakuum	5
Viergittersystem	10
Viergittersystem	21
Zusammenfassung	67
Überstrukturnomenklatur	70

Diese Arbeit wurde am Institut für Kristallographie und Mineralogie der Universität München angefertigt.

Herrn Prof. Dr. Dr.h.c. H. Jagodzinski danke ich für die Anregung dieser Arbeit und für die stete Unterstützung durch kritische und hilfreiche Diskussion.

Herrn Dr. W. Moritz gebührt mein Dank für die zahlreichen Intensitätsrechnungen und für die fruchtbare Zusammenarbeit bei deren Auswertung.

Herrn Dr. D. Wolf bin ich für viele Hinweise, die beim apparativen Aufbau und bei der Durchführung der Messungen hilfreich waren, dankbar.

Die Herren H. Plöckl und J. Cszisar schufen durch ihre sorgfältige Arbeit die technischen Voraussetzungen für die Experimente; ihnen und allen anderen Angehörigen der Institutswerkstatt, die am mechanischen und elektronischen Aufbau beteiligt waren, möchte ich an dieser Stelle danken.

Fräulein G. Prätzel und Herrn X. Gappa verdanke ich etliche für diese Arbeit angefertigte Graphiken und Reproduktionen.

Nicht zuletzt möchte ich meiner Frau und meinem Sohn danken, die durch ihre Geduld und ihr Verständnis diese Arbeit ermöglichten.

Lebenslauf

Wolfgang Hösler, geb. 13.12.1951 in Landsberg am Lech

1958-1962 Besuch der Volksschule in Gauting und

1962-1971 des naturwissenschaftlichen Gymnasiums in Starnberg.

1971-1977 Studium der Physik an der Technischen Universität in München und

1977 Abschluß der Diplomprüfung in Physik mit der Diplomarbeit 'Aufbau eines induktiven Dilatometers mit SQUID-Detektor', durchgeführt am Institut für Tieftemperaturforschung der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

Ab 1977 wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Kristallographie und Mineralogie der Ludwig-Maximilians-Universität zu München.

